# UNTERSUCHUNG EINER REINEN UND SAUERSTOFF-BEDECKTEN 60/40 NiFe (110)-OBERFLÄCHE MIT IONEN – OBERFLÄCHENGITTERFÜHRUNG

Wolfram Graser

Diss
München
1984

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41544313_0026

# UNTERSUCHUNG EINER REINEN UND SAUERSTOFF - BEDECKTEN 60/40 NiFe (110) - OBERFLÄCHE MIT IONEN - OBERFLÄCHENGITTERFÜHRUNG

Dissertation

der Fakultät für Physik

der Ludwig-Maximilians-Universität München

Vorgelegt von

Wolfram Graser

aus München

München, den 5. Dezember 1983

1. Gutachter : Prof. Dr. R. Sizmann

2. Gutachter : Prof. Dr. H. Bross

Tag der mündlichen Prüfung : 13.6.1984

DISSERTATIONS - UND FOTODRUCK FRANK GmbH
8000 München 2, Gabelsbergerstraße 15, Tel. 2809090

INHALTSVERZEICHNIS


| | | Seite |
|---|---|---|
| 1. | ZUSAMMENFASSUNG | 3 |
| 2. | EINLEITUNG | 5 |
| 3. | EXPERIMENTELLE ANORDNUNGEN | 8 |
| | 3.1 Kristallpräparation | 8 |
| | 3.2 Streukammer | 11 |
| | 3.3 Optische Meßeinrichtung | 16 |
| | 3.3.1 Aufbau | 16 |
| | 3.3.2 Analyse der Polarisation | 21 |
| | 3.4 Oberflächenanalyse mit Elektronen niedriger Energie | 26 |
| 4. | REAKTION DER 6o/4o-NiFe-(11o)-OBERFLÄCHE MIT SAUERSTOFF | 30 |
| | 4.1 Bisherige Untersuchungen an NiFe-Legierungen | 30 |
| | 4.2 Auger-Spektroskopie der Oberfläche | 31 |
| | 4.3 LEED-Strukturen | 37 |
| | 4.4 Sauerstoffbedeckung bei $C \leq 1/3$ Monolage | 41 |
| | 4.5 Sauerstoffbedeckung bei $1/3 \leq C \leq 1/2$ Monolage | 48 |
| | 4.5.1 Bedeckungszunahme | 48 |
| | 4.5.2 Modelle für die LEED-Strukturen bei $C = o.4$ und $C = o.5$ | 52 |
| | 4.5.3 Berechnung der LEED-Strukturen bei $C = o.4$ und $C = o.5$ | 57 |
| | 4.5.4 Laser-Simulation von LEED-Strukturen | 62 |
| | 4.6 Oxidbildung, $1/2 \leq C \leq 6/5$ Monolagen | 63 |
| | 4.6.1 Bedeckungszunahme | 63 |
| | 4.6.2 LEED-Struktur und Oberflächenmodell | 64 |
| | 4.7 Druckabhängige Bedeckungszunahme bei $C > 6/5$ Monolagen | 68 |
| | 4.8 Änderungen der Austrittsarbeit | 73 |
| | 4.9 Anwachsen der oxidischen 53 eV-FeO-Augerlinie | 76 |
| | 4.1o Vergleich mit der Oxidation anderer Oberflächen | 76 |
| | 4.1o.1 (1oo)-59/41-NiFe | 76 |
| | 4.1o.2 fcc-(11o)-Ni und bcc-(11o)-Fe | 80 |
| | 4.1o.3 andere fcc-(11o)-Oberflächen | 83 |

5. GRUNDLAGEN DER COMPUTER-SIMULATION 85

5.1 Bahn eines Projektils 85
5.2 Binärer Stoß 87
5.3 Ablenkwinkel 90
5.4 Gitterschwingungen 96
5.4.1 Gitterschwingungen im Inneren des Kristalls 96
5.4.2 Gitterschwingungen der ersten beiden Atomlagen 98
5.4.3 Korrelation der Gitterschwingungen 100
5.4.4 Schwingungen der adsorbierten Sauerstoffatome 101
5.5 Energieverlust 102
5.5.1 Empirischer, stoßparameter-unabhängiger Energieverlust 103
5.5.2 Theorie von Lindhard und Winther 105
5.5.3 Stoßparameter-abhängiger Energieverlust 107
5.5.4 Energieverlust beim Stoß mit einem Sauerstofatom 110
5.6 Kinetische Emission von Sekundärelektronen (Targetstrom) 112
5.7 Neutralisation 114
5.8 Lichtanregung des $He^{+}$-468.6 nm-Übergangs 118
5.9 Lichtanregung des $He^{o}$-587.6 nm-Übergangs 121

6. ERGEBNISSE VON COMPUTER-SIMULATIONEN UND IONEN-STREUEXPERIMENTEN 125

6.1 Korrelierte Streuung an einer Atomkette 125
6.2 Flußdichteverteilungen 132
6.3 Einfluß von Oberflächen-Stufen auf die axiale Gitterführung 142
6.4 Planare Gitterführung 152
6.5 Planare Gitterführung in Gegenwart von adsorbiertem Sauerstoff 158
6.6 Einfluß der Stoßparameter-Abhängigkeit des Energieverlusts 162
6.7 Targetstrom 165

7. POSITIONSBESTIMMUNG VON ADSORBIERTEM SAUERSTOFF DURCH AXIALE OBERFLÄCHEN-GITTERFÜHRUNG 170

7.1 Allgemeines 170
7.2 Ergebnisse der Experimente und Simulationen 172
7.3 Simulation verschiedener Höhen der Sauerstoffatome 178
7.4 Simulation anderer Sauerstoff-Positionen 181
7.5 Bewertung der Lichtanregungsmethode 183

8. EXPERIMENTE UND SIMULATIONEN ZUR LICHTANREGUNG UND POLARISATION 184

8.1 Allgemeines 184
8.1.1 Lichtanregung und Polarisation als Oberflächeneffekt 184
8.1.2 Theorien zur Entstehung von zirkularpolarisiertem Licht 185
8.2 Ergebnisse für die $He^{+}$-468.6 nm-Strahlung 187
8.2.1 S/I als Funktion der Sauerstoffbedeckung 187
8.2.2 Lichtausbeute als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\phi$ 189
8.2.3 Abregung nach Anregung an adsorbierten Atomen 193
8.2.4 S/I als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\phi$ 197
8.2.5 Zirkularpolarisation durch Anregung an adsorbierten Atomen 197
8.2.6 S/I als Funktion des Streuwinkels 202
8.2.7 Computer-Simulation der Zirkularpolarisation 206
8.2.8 S/I bei planarer Gitterführung 210
8.2.9 S/I bei axialer Gitterführung 210
8.3 Ergebnisse für den $He^{o}$-587.6 nm-Übergang 217
8.3.1 Axiale Gitterführung 217
8.3.2 Planare Gitterführung 220
8.4 Diskussion anderer Modelle zur Beschreibung von Veränderungen der Zirkularpolarisation 223

9. DAS COMPUTER-PROGRAMM UND SEINE BEDIENUNG 226

9.1 Eingabe-Daten 226
9.2 Ausgabe-Daten 229
9.3 Flußdiagramm 232
9.4 Auflistung des Simulations-Programms 234
9.5 Auflistung des getrennten Auswert-Programms 249

1o. LITERATURVERZEICHNIS 256

## 1. ZUSAMMENFASSUNG

Die Position von Sauerstoffatomen auf einer 60/40 - NiFe - (110) - Oberfläche bei einer Bedeckung von 1/3 Monolage wurde unter Verwendung der axialen Oberflächen - Gitterführung von 200 keV $He^+$- Ionen bestimmt. Dazu wurde die Streuausbeute der streifend einfallenden Ionen für verschiedene, niedrig indizierte Richtungen gemessen. Diese wird durch axiale Gitterführung an den Ketten der adsorbierten Atome auf charakteristische Weise gegenüber der reinen Oberfläche verändert. Durch die Entwicklung eines Computer-Programms konnten die Meßdaten mit Ergebnissen entsprechender Simulationen verglichen werden. Damit wurden die Sauerstoffatome in der kurzen Brückenposition in 0.125 ± 0.025 nm Höhe über der Oberfläche lokalisiert.

Zur Messung der Streuausbeute wurde die Lichtemission der an der Oberfläche angeregten Teilchen benützt. Um den Zusammenhang zwischen Streu- und Strahlungsausbeute zu finden, wurden die Stokes-Parameter des $He^+$- ($n = 4 \rightarrow 3$) - 468.6 nm - Übergangs und des $He^o$- ($3^3D \rightarrow 2^3P$) - 587.6 nm - Übergangs untersucht. Es wurde festgestellt, daß sie vom Einfallswinkel zu einer niedrig indizierten Gitterrichtung, von der Bedeckung der Oberfläche und vom Austrittswinkel der gestreuten Teilchen abhängen. Diese Meßergebnisse konnten durch ein Modell erklärt werden, in dem die Anregung durch Stöße mit adsorbierten Atomen mitberücksichtigt wird.

Durch Verknüpfung von Streuexperimenten mit Computer-Simulationen wurde die axiale Oberflächen-Gitterführung erstmals auch zur Bestimmung der mittleren Stufendichte an Kristalloberflächen angewendet. Für die elektropolierte NiFe - Oberfläche wurde ein mittlerer Stufenabstand von 75 Atomabständen in $[1\bar{1}0]$ - Richtung ermittelt.

Die Reaktion der 60/40 - NiFe - (110) - Oberfläche mit Sauerstoff wurde mit LEED, AES und Austrittsarbeitsänderung erstmals untersucht. Nach einer anfänglich schnellen, dissoziativen Adsorption geht die Haftwahrscheinlichkeit bei einer Bedeckung von 1/3 Monolage durch kinetische Blockierung der Adsorptionsplätze stark zurück. Zwischen 1/2 und 1.2 Monolagen bildet sich eine hexagonale Oxidschicht ähnlich der (111) - Ebene in NiO oder FeO. Bei Bedeckungen größer als 1.2 Monolagen ist die Adsorption druckunabhängig.

## 2. EINLEITUNG

Erst mit der Verfügbarkeit der Ultrahochvakuum-Technik wurde bei der Erforschung der Wirkung von Katalysatoren die Untersuchung der Adsorption von Gasen auf einkristallinen Oberflächen im Submonolagen-Bereich möglich (1). Von besonderem Interesse ist dabei die geometrische Position des adsorbierten Atoms in Bezug auf die Substratatome.

Diese Position wurde vorwiegend mit der Methode der Beugung langsamer Elektronen (LEED) bestimmt. Ein auswertbares Beugungsbild wird jedoch nur erhalten, wenn die adsorbierten Atome periodisch angeordnet sind. Die Analyse erfordert im Hinblick auf die Positionsbestimmung eine aufwendige Rechenarbeit (2). Die Streuung langsamer Ionen (LEIS) wurde ebenfalls zur Positionsbestimmung herangezogen (3-5). Neutralisationseffekte erschweren dabei die Deutungen zum Teil erheblich. Rutherford-Rückstreuung von Protonen mittlerer Energie (MEIS) wurde benützt, um die Position adsorbierter Schwefelatome zu bestimmen (6). Da bei dieser Methode ein möglichst großer Streu-Wirkungsquerschnitt des adsorbierten Atoms nötig ist, wurde die Position leichterer Atome (z.B. Sauerstoff) bisher nicht untersucht.

Einen neuen Zugang zur Positionsbestimmung bietet die axiale Oberflächen-Gitterführung von schnellen, streifend einfallenden Ionen (7). Die von den geführten Ionen an adsorbierten Atomen ausgelösten Kernreaktionen sind zu deren Positionsbestimmung benützt worden (8,9).

In der vorliegenden Arbeit wird eine neue Methode beschrieben, bei der die axiale Oberflächen-Gitterführung zur Positionsbestimmung adsorbierter Atome benutzt wird. Diese Methode beruht darauf, daß die Ionen nicht nur an den Atomketten des Substrats sondern auch an den Ketten der adsorbierten Fremdatome korreliert gestreut werden können. Dadurch ergeben sich gegenüber der reinen Oberfläche Umverteilungen in der Ionen-Flußdichte. Das Eindringen der Ionen zwischen die Atomketten der Oberfläche kann durch die adsorbierten Atomketten ganz oder teilweise blockiert werden. Dadurch verändert sich die Streuausbeute auf für die Position der adsorbierten Atome charakteristische Weise.

Dieses Verfahren wurde an einer 60/40-NiFe-(110)-Oberfläche untersucht, auf der Sauerstoff adsorbiert wurde. Die Eigenschaften dieses Adsorptionssystems waren nicht bekannt. Sie sind von Interesse, da Nickel und Eisen als Katalysatoren in der Methanation und beim Fischer-Tropsch-Verfahren der Kohle-Hydrierung verwendet werden. Weiter benützt man die magnetischen Eigenschaften der NiFe-Legierungen (Permalloy: 80/20 NiFe) u.a. in Dünnschichtanordnungen. Dabei kann Korrosion zu Veränderungen der gewünschten Eigenschaften führen. Die Reaktion der Oberfläche mit Sauerstoff wurde deshalb zunächst mit Standard-Oberflächen-Analysemethoden wie AES ( Augerelektronen-Spektroskopie ) , LEED ( Beugung niederenergetischer Elektronen) und Austrittsarbeitsänderung untersucht. Die Ergebnisse sollten definierte Bedingungen für die Ionen- Streuexperimente festlegen.

Zum Verständnis der Reflexionsausbeuten bei Gitterführungsbedingungen sollten Computer-Simulationen durchgeführt werden, durch die die Wirkung verschiedener Adsorptionsplätze und -höhen untersucht werden kann. Die Simulationen sollten den verschiedenen experimentellen Bedingungen angepaßt werden können und thermische Gitterschwingungen und Oberflächenstufen berücksichtigen.

Die gestreuten Teilchen verlassen die Oberfläche teilweise angeregt und senden auf ihrem weiteren Weg Licht aus. Vorangegangene Experimente (10,11) haben vermuten lassen, daß die Lichtemission als Maß für die relative Anzahl gestreuter Teilchen gelten kann. Diese Lichtemission sollte deshalb zur Bestimmung der Reflexionsausbeute verwendet werden. Die optische Nachweistechnik hat dabei den grundsätzlichen Vorteil, daß die Nachweisgeräte nicht in die Vakuum-Kammer eingebaut werden müssen, sondern frei zugänglich außerhalb der Kammer angebracht werden.

Der Lichtanregungsprozeß der Ionen bei der Wechselwirkung mit einem Festkörper ist noch weitgehend ungeklärt. Die Vermutung, daß die Lichtemission ein Maß für die Anzahl gestreuter Teilchen ist, sollte daher überprüft werden, da seit Messungen von Berry et al. (12) bekannt ist, daß die Lichtanregung im Oberflächenbereich eintritt und daher möglicherweise durch deren Zustand mit beeinflußt wird. Von Berry et al. wurde gefunden, daß das Licht von Ionen nach Durchtritt durch eine schräg gestellte Folie zirkular polarisiert ist.
Nach einer Anregung im Inneren der Folie wäre aus Symmetriegründen keine Zirkularpolarisation zu erwarten. Es sollte daher experimentell untersucht werden, welchen Einfluß die Projektilbahnen und adsorbierten Gase auf die Lichtausbeute und die Polarisationszustände haben. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sollten in den Computer-Simulationen der Ionen-Streuexperimente berücksichtigt werden.

# 3. EXPERIMENTELLE ANORDNUNGEN

## 3.1 KRISTALLPRÄPARATION

Die Oberfläche eines kubisch flächenzentrierten (fcc)NiFe-Einkristalls der Zusammensetzung 6o % Ni, 4o % Fe wurde mit Naßschleifpapier mit verschiedenen Körnungen bis zu 12oo/$cm^2$ eben geschliffen und anschließend ca 1 min in Königswasser geätzt. Mit der Laue-Röntgen-Rückstreutechnik wurde festgestellt, daß die Orientierung dieser Oberfläche nahe bei einer (11o)-Ebene lag. Der Fehler wurde durch Abschleifen korrigiert. Eine erneute Laue-Aufnahme zeigt, daß der Orientierungsfehler nach der Korrektur kleiner als o.1° war (Abb. 3.1). Danach war die Dicke der Probe 2.5 mm. Die Maße der elliptischen Oberfläche waren 17 mm in [1$\bar{1}$0]-Richtung und 15 mm in [001]-Richtung. Anschließend wurde die Oberfläche auf einer Poliermaschine mit Diamantschleifpaste der Körnung 7µ und 1µ poliert. Da dabei eine etwa 1oµ dicke, amorphe Schicht erzeugt wird, wurde eine solche Schichtdicke durch Elektropolieren in einem Elektrolyt aus 3 Teilen 85 % Orthophosphorsäure $H_3PO_4$, 1 Teil 96 % Schwefelsäure $H_2SO_4$ und 1 Teil 87 % Glyzerin bei einer Stromdichte von o.1 A/$cm^2$ entfernt. Dabei entsteht jedoch eine Orangenhaut-Welligkeit, die einen starken Einfluß auf die Ionenstreu-Experimente bei axialer Gitterführung (Abs. 6.3) sowie, in bestimmten Phasen, auf die Reaktionsgeschwindigkeit mit Sauerstoff (Abs. 4.5.2) hat. Diese Welligkeit wurde mit einem Laserstrahl untersucht, der senkrecht auf die Oberfläche trifft. Der reflektierte Strahl zeigt eine Aufweitung. Die Winkelverteilung in der reflektierenden Oberfläche, die

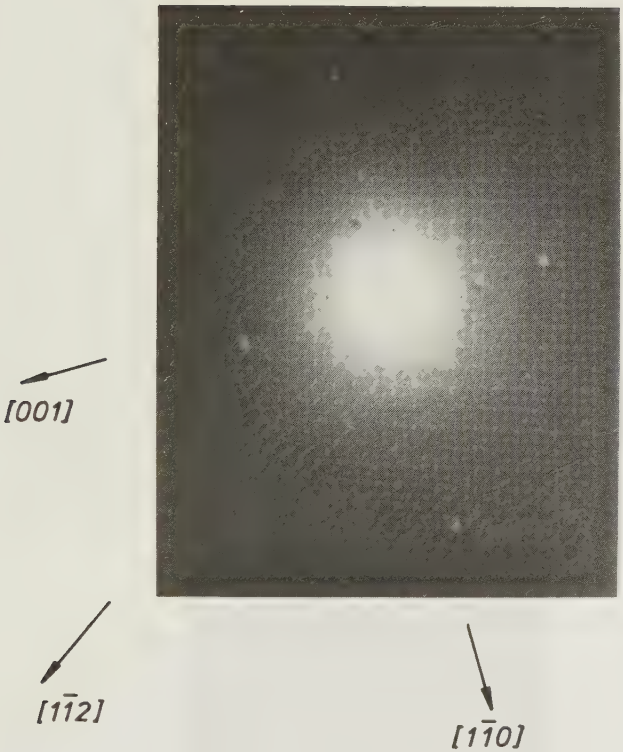



Abb. 3.1 : Laue - Beugungsbild der (110)- 60/40 - NiFe - Oberfläche

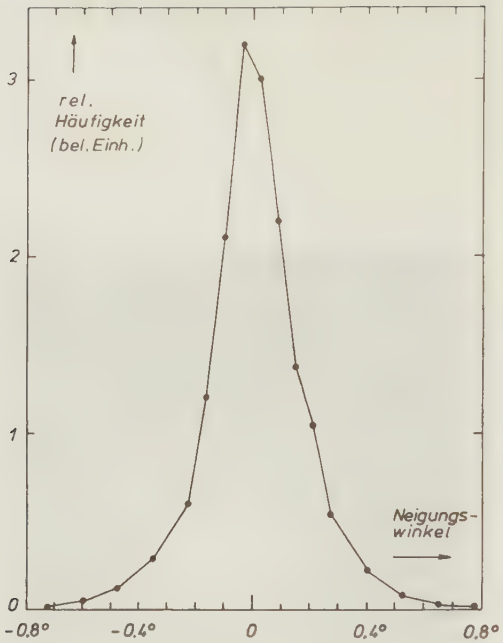



Abb. 3.2 : Winkelverteilung der Oberflächen - Welligkeit

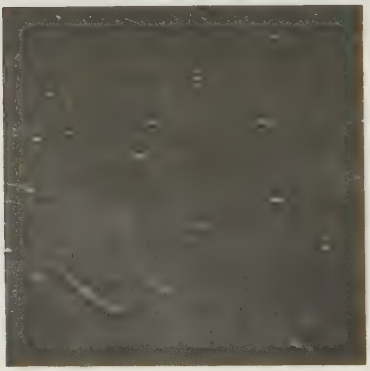


Abb. 3.3 : REM - Aufnahme der Oberfläche
Kantenlänge des Bilds : 200 $\mu$m

durch Photometrierung des aufgeweiteten Strahls bestimmt wurde, zeigt Abb. 3.2. Aus dieser Kurve wurde die mittlere lokale Abweichung von einer ebenen Oberfläche zu $o.14^{o}$ bestimmt. Dabei werden jedoch nur Rauhigkeitskomponenten erfaßt, die größer als die Wellenlänge des Laserlichts (633 nm) sind. Unter dem Rasterelektronenmikroskop sind restliche Kratzer, Ätzgrübchen sowie Welligkeiten verschiedener Ausdehnung zu beobachten (Abb. 3.3).

Nach dem Einbau in die Vakuumkammer wurde die Oberfläche durch 1o minütigen Beschuß mit 2.5 keV Ne-Ionen und thermisches Ausheilen (ca. 5 min. bei $1ooo^{o}C$) gereinigt. Durch das thermische Ausheilen trat anfänglich Schwefel durch Segregation aus dem Inneren des Kristalls an die Oberfläche. Nach etwa 5o Sputter- und Ausheil-Zyklen waren jedoch keine Verunreinigungen mehr durch AES nachweisbar (vgl. Abb. 4.1). Durch LEED wurde eine p(1 x 1)-Struktur der Oberfläche nachgewiesen, d.h. daß die oberste Atomebene dieselbe laterale Struktur aufweist, wie eine Atomebene im Inneren des Kristalls. Die einkristalline Struktur der obersten Atomebene wurde auch durch charakteristische Blocking- und Streubilder nachgewiesen, die von den gestreuten Ionen erzeugt werden (vgl. Abs. 3.2).

## 3.2 DIE STREUKAMMER

Die experimentelle Anordnung in der Streukammer in der Höhe des Ionenstrahls zeigt Abb. 3.4. Die Divergenz des massenanalysierten Ionenstrahls wird durch zwei Blenden vor der Streukammer (Abstand 2 m; Ø: 1 mm) bestimmt. Sie ist kleiner als $o.1^{o}$. Ein sich drehendes Flügelrad mit Schleifkontakt entnimmt dem Strahl etwa 1o mal pro Sekunde Stromproben.

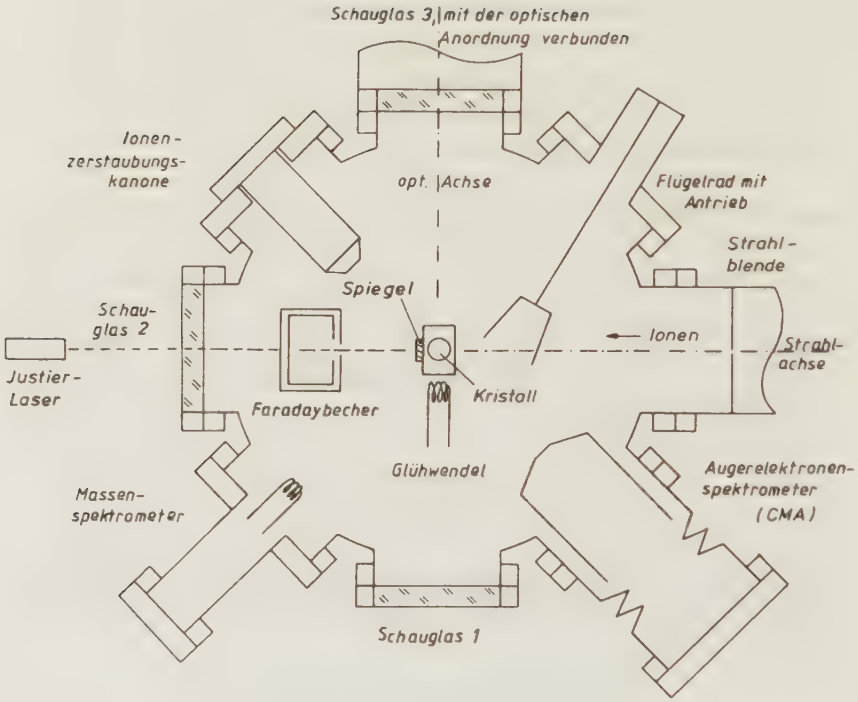



Abb. 3.4 : Streukammer

Der Strom wird einem Stromintegrator zugeführt, der bei Erreichen einer vorgebbaren Ladungsmenge eine Messung beendet. Dadurch ist diese Messung von Schwankungen der Strahlintensität annähernd unabhängig. Schwankungen in der Intensitätsverteilung im Strahl werden dabei nicht erfaßt. Diese können jedoch den Strahlanteil, der auf die Kristalloberfläche trifft, verändern. Besonders bei den Messungen zur Untersuchung der Polarisation des emittierten Lichts waren deshalb möglichst konstante Verhältnisse in der Quelle des Beschleunigers erforderlich.

Der Ionenstrahl trifft in der Mitte der Streukammer auf den Kristall, der isoliert auf einem Goniometer montiert ist. Die zu untersuchende Oberfläche des Kristalls liegt in der Bildebene. Durch das Goniometer sind Verschiebungen in Bezug auf alle Raumrichtungen möglich. Der Kristall kann durch direkten Elektronenbeschuß der untersuchten Oberfläche bis zur Schmelztemperatur (ca. 1450°C) erhitzt werden. Dazu wird er an eine Hochspannung von 4 kV angeschlossen. Die Elektronen werden aus einer Glühwendel emittiert (Auto-Scheinwerferbirne). Bei einem Emissionsstrom von 5 mA (≙ 20 W) erreicht der Kristall in einigen Minuten Rotglut. Die Temperatur kann durch ein Pyrometer überwacht werden. Nach Abklemmen der Hochspannung wurde der Verlauf der Abkühlung durch ein Thermoelement, das an der Rückseite des Kristalls angebracht war, gemessen: 15 min nach Erhitzen auf 700°C war die Temperatur auf 150°C gesunken. Die Computer-Simulationen zu den Messungen wurden deshalb bei einer Temperatur von 450 K durchgeführt. Dies ist die Temperatur, die sich im Mittel während den Messungen (etwa 15 min nach dem Glühen) eingestellt hat.
Der direkte Ionenstrahl kann am fluoreszierenden Schauglas 2 beobachtet werden. Die gestreuten Teilchen erzeugen auf diesem Schauglas Streu- und Blockingbilder, die für die jeweiligen Einschußwinkel charakteristisch sind (13). Durch Beobachtung dieser Bilder erfolgt eine erste grobe Orientierung

des Kristalls zum Ionenstrahl. Anschließend wird die Feinjustierung durch Messung des Targetstroms in drei Schritten vorgenommen:

1. Der senkrechte Einschußwinkel $\phi = o^{\circ}$ (die Oberfläche steht parallel zum Strahl) wird auf folgende Weise eingestellt:
   Der Kristall wird vertikal so weit verschoben, daß seine Oberfläche den unteren Rand des Ionenstrahls gerade berührt. Bei Veränderung von $\phi$ ergibt sich dann ein deutliches Minimum des Targetstroms bei $\phi = o^{\circ}$.

2. Wird der Kristall bei $\phi = o^{\circ}$ vertikal in den Ionenstrahl hineingeschoben, so erreicht der Targetstrom ein Maximum, wenn der ganze Ionenstrahl auf seine Stirnfläche trifft. In der vertikalen Stellung, in der der Targetstrom gerade die Hälfte dieses Maximums beträgt, befindet sich die Oberfläche genau in der Mitte des Ionenstrahls.

3. Zur Festlegung des seitlichen Einschußwinkels $\theta = o^{\circ}$ zu einer niedrig indizierten Gitterrichtung wird ein Winkel $\phi > o^{\circ}$ eingestellt. Im Targetstrom treten dann als Funktion von $\theta$ Minima bzw. Maxima auf, wie sie in Abs. 6.7 beschrieben werden. Die Maxima bei axialer Gitterführung (Abb. 6.21) eignen sich am besten zur eindeutigen Festlegung von $\theta = o^{\circ}$, da in ihrer nähren Umgebung keine weiteren Maxima auftreten.

Die jeweiligen Nullstellungen der Winkel $\Theta$ und $\phi$ können auf diese Weise schnell und mit einer Genauigkeit von $\pm$ o.1° definiert werden. Diese Nullstellungen werden durch den Strahl eines Justierlasers, der von einer an der Kristallhalterung angebrachten Spiegelfläche reflektiert wird, auf einer Skala außerhalb der Streukammer markiert. Veränderungen von $\Theta$und $\phi$ können von nun an, unabhängig von der nicht spielfreien Goniometerführung, an dieser Skala abgelesen werden. Der seitliche Einschußwinkel $\Theta$ wird während den Messungen durch einen Schrittmotor in vorgebbaren Intervallen verändert.

Ein verschiebbarer Faraday-Becher mit einer Öffnung von 2 mm kann zur Überprüfung des Strahlstroms, zu Justierzwecken sowie zur Messung des Stroms gestreuter Ionen verwendet werden (vgl. Abs. 6.4).

An der Streukammer sind Bayard-Alpert-Druckmeßröhren und Feindosierventile für die Zugabe von hochreinem Sauerstoff- und Neongas angebracht. Das Vakuum wird von einer 2oo l/s-Turbomolekularpumpe mit Vorpumpe (Fa. Balzers) erzeugt. Ohne Ausheizen wird mit dieser Pumpe allein ein Enddruck von etwa $2 \cdot 1o^{-8}$ mbar erreicht. Bei zusätzlicher Benützung einer Titan-Verdampfer-Pumpe in Verbindung mit einem flüssig-stickstoffgefüllten Kühlschild wird nach 12-stündigem Ausheizen der Kammer auf 25o°C ein Restgasdruck von $2 \cdot 1o^{-1o}$ mbar erreicht. Bei diesem Druck ist eine gereinigte Oberfläche nach 15 min mit o.1 Monolagen an Restgas-Atomen oder -Molekülen bedeckt. Die Analyse des Restgases mit dem Quadrupol-Massenspektrometer zeigt, daß dieses vorwiegend aus $H_2$, $H_2O$ und CO zusammengesetzt ist.

Für die Untersuchungen der Reaktion der Oberfläche mit Sauerstoff (Abs. 4) wurde statt dem Schauglas 3 (Abb. 3.4) die LEED-Apparatur (Abs. 3.4) eingesetzt. In dieser experimentellen Anordnung wurden keine Ionenstreu-Experimente

durchgeführt. Das CMA-Spektrometer (Abs. 3.4) wurde in beiden Anordnungen benützt, so daß dadurch die jeweiligen Ergebnisse verknüpft waren.

## 3.3 OPTISCHE MESSEINRICHTUNG

### 3.3.1 Aufbau

Das Licht, das von den gestreuten $He^+$-Ionen und $He^o$-Atomen ausgesendet wird, tritt durch Schauglas 3 (Abb. 3.4) aus der Vakuumkammer aus. Dieses Schauglas ist bei den untersuchten Wellenlängen zu 93 % transparent. Eine lineare oder zirkulare Polarisierungswirkung, z.B durch mechanische Spannungsfelder, wurde nicht festgestellt.

Die Lichtausbeute und die Polarisation werden in einer an die Vakuumkammer lichtdicht angebauten optischen Anordnung gemessen. Diese in in Abb. 3.5 dargestellt, gesehen aus der Richtung des Flügelrades in Abb. 3.4. In Abb. 3.5 ist die Definition der Ionen-Einschußwinkel $\phi$ und $\Theta$ erkennbar: $\phi$ ist der Einschußwinkel senkrecht zur Oberfläche; wird der einfallende Strahl senkrecht in die Oberfläche projiziert, so ist $\vartheta$ der Winkel dieser Projektion zu einer ausgewählten, niedrig indizierten Gitterrichtung. Die optische Achse steht senkrecht auf der Richtung des einfallenden Strahls. Da die gestreuten Teilchen überwiegend in Vorwärtsrichtung austreten, sind Wellenlängenverschiebungen durch den transversalen Dopplereffekt klein gegen die Halbwertsbreite der Interferenzfilter. Für schräg seitlich austretende Teilchen gilt dies nicht mehr. Deswegen kann der Dopplereffekt in den Computer-Simulationen der Experimente berücksichtigt werden.

Das emittierte Licht wird von der Sammellinse L1 (f = 8o mm, Ø = 48 mm) fokusiert. In der Bildebene befindet sich eine

Blende mit den Maßen 1,5 mm x 6 mm, deren virtuelles, dreifach vergrößertes Bild hinter dem Kristall den Nachweisbereich festlegt. Wird die Blende mit ihrer langen Seite parallel zur Kristalloberfläche gestellt, so werden Teilchen mit Austrittswinkeln $\phi_{aus}$ senkrecht zur Oberfläche bis etwa $1o^{o}$ erfaßt, bei senkrecht gestellter Blende bis etwa $6o^{o}$.
Anschließend wird das Licht von der zweiten Sammelinse (f = 25 mm, Ø = 11.5 mm) parallelgerichtet. Für diese beiden Linsen wurden sphärisch korrigierte Achromate der Fa. Spindler & Hoyer verwendet, die gegenüber unkorrigierten Linsen einen Intensitätsgewinn von etwa einer Größenordnung ergeben.
In dem parallelen Strahlengang hinter der zweiten Sammellinse folgt ein Interferenzfilter (Fa. Dr. H.Anders, Nabburg), das wahlweise Licht der Wellenlänge 468.6 nm, das von den angeregten $He^{+}$-Ionen emittiert wird, oder der Wellenlänge 587.6 nm, das von den angeregten $He^{o}$-Atomen emittiert wird, durchtreten läßt. Die vollen Halbwertsbreiten der Gauß-förmigen Transmissionskurven sind nach Herstellerangaben 5.5 nm (14).

Die Polarisation des Lichts wird mit einer drehbaren $\lambda/4$-Phasenverschiebungsplatte und einem feststehenden Linearpolarisator untersucht. Die $\lambda/4$-Platten wurden speziell für die beiden beobachteten Wellenlängen von der Firma B. Halle Nachf., Berlin, geliefert. Dafür wurde eine Fassung angefertigt, die nach Drehung um jeweils $22.5^{o}$ einrastet. Durch Drähte kann die $\lambda/4$-Platte von außerhalb des lichtdichten Kastens gedreht werden. Der feststehende Linearpolarisator (Fa. Spindler & Hoyer) wirkt bei beiden Wellenlängen.
Das analysierte Licht wird von einer am Photomultiplier-Gehäuse fest angebrachten Sammellinse (f = 23 mm, Ø = 25 mm) auf die lichtempfindliche Katode (Ø = 1o mm) des ungekühl-

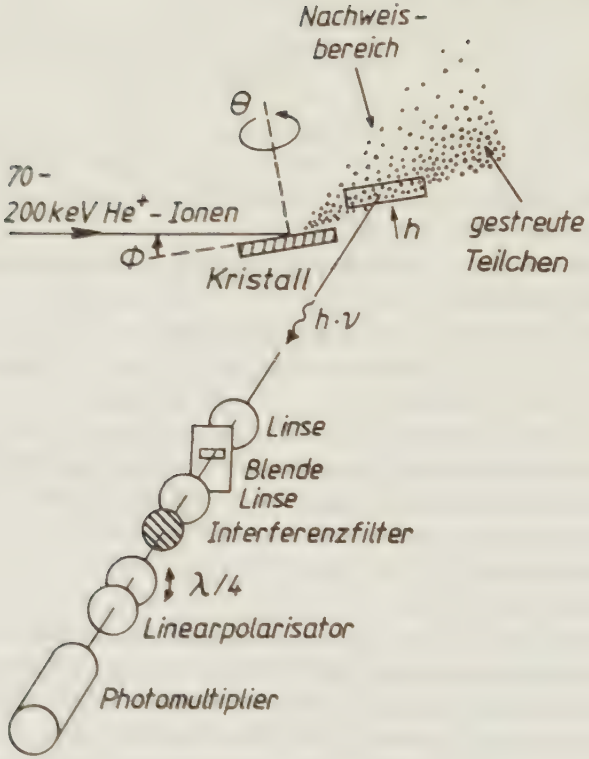



Abb. 3.5 : Optische Meßeinrichtung

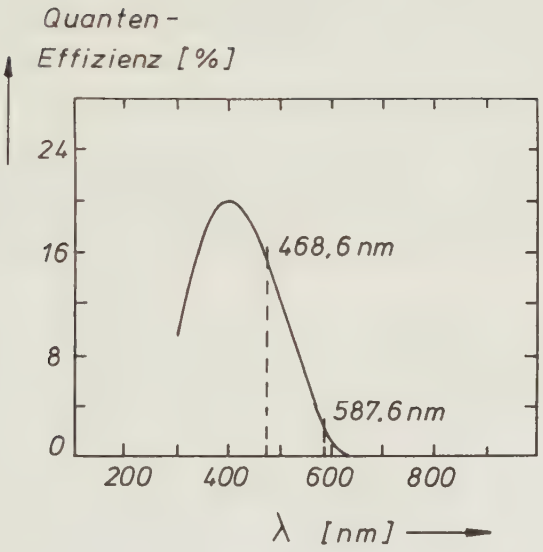



Abb. 3.6 : Spektrale Empfindlichkeit des Photomultipliers EMI 9789 B

ten Photomultipliers EMI 9789 B gerichtet. Dessen spektrale Empfindlichkeit (Abb. 3.6) ist für die 587.6 nm-Strahlung verringert. Die Lichtausbeute war jedoch genügend groß, so daß nur bei wenigen Experimenten die Dunkelzählrate von ca. 1oo Impulsen/min abgezogen werden mußte (die Lichtemission kann bei größeren Strahlströmen mit bloßem Auge beobachtet werden).

Die gesamte optische Anordnung ist auf einem verstellbaren Tisch montiert und kann in ihrer Höhe justiert werden. Dadurch ändert sich auch die Höhe des Nachweisbereichs hinter dem Kristall. Dies wurde zur Untersuchung der Lichtemission als Funktion des Austrittswinkels benutzt (Abs. 8.2.6).

Bei der Justierung des Abstands der optischen Blende von der ersten Sammellinse unterlief ein systematischer Fehler: Diese Justierung wurde jeweils so vorgenommen, daß der Kristall durch das gegenüberliegende Fenster 1 der Streukammer (Abb. 3.4) mit einer Lampe beleuchtet wurde. Die Blende wurde dann so zwischen den Linsen verschoben, daß das Schattenbild des Kristalls scharf erschien. Da das von der Lampe ausgehende Licht jedoch divergent ist, ergibt sich daraus ein Justierfehler, der vermieden werden kann, wenn der Kristall selbstleuchtend abgebildet wird, z.B. durch Beleuchtung von Fenster 2 aus. Das virtuelle Bild der Blende hinter dem Kristall war deswegen unscharf. Dies führte zu einem Verlust in der Auflösung der senkrechten Austrittswinkel, der, falls notwendig, bei der Simulation der Experimente im weiteren berücksichtigt wird (vergl. Abs. 8.2.7).

### 3.3.2 Analyse der Polarisation

Dreht sich der Vektor des elektrischen Felds im Uhrzeigersinn, wenn das Licht entgegen seiner Ausbreitungsrichtung beobachtet wird, so heißt dieses Licht rechtszirkular polarisiert (engl. "right hand circularly polarized").
Die Definition der Helizität H bezieht sich auf die Orientierung des Eigendrehimpulses $\vec{s}$ ($|\vec{s}|/\hbar = 1$) des Photons zu seinem Impuls p:

$$H = \frac{\vec{p} \cdot \vec{s}}{|\vec{p}| \cdot |\vec{s}|}$$

Bei rechtszirkular polarisiertem Licht sind Impuls und Spin antiparallel gerichtet (H = -1).

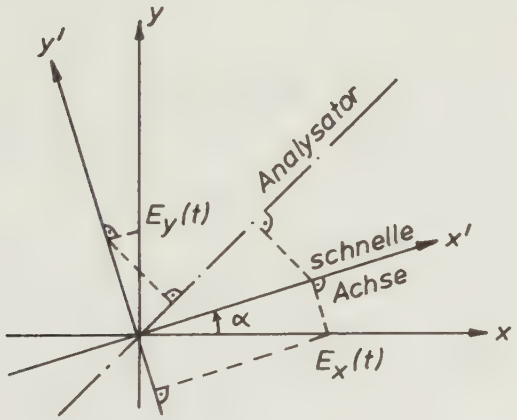



Abb. 3.7 : Koordinatensystem zur Analyse der Polarisation des Lichts

Tabelle 3.1

| | lineare Polarisation | | | | zirkulare Polarisation | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | x-Rchtg. ↔ | y-Rchtg. ↕ | 45° ⤢ | -45° ⤡ | rechts ↻ | links ↺ | |
| $a_x$ | 1 | 0 | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | Feld (norm.) vor $\lambda/4$ |
| $a_y$ | 0 | 1 | $1/\sqrt{2}$ | $-1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | $1/\sqrt{2}$ | |
| $\varphi$ | 0 | 0 | 0 | 0 | $\pi/2$ | $-\pi/2$ | |
| Stellung der $\lambda/4$-Platte : | | | | | | | |
| $\alpha = 0^\circ$ | 1/2 | 1/2 | 1/2 | 1/2 | 1 | 0 | normierte Intensität $I_\alpha$ hinter dem Analysator |
| $22.5^\circ$ | 3/4 | 1/4 | 3/4 | 1/4 | $(1+\sqrt{2})/2$ | $(1-\sqrt{2})/2$ | |
| $45^\circ$ | 1/2 | 1/2 | 1 | 0 | 1/2 | 1/2 | |
| $90^\circ$ | 1/2 | 1/2 | 1/2 | 1/2 | 0 | 1 | |
| $112.5^\circ$ | 3/4 | 1/4 | 3/4 | 1/4 | $(1-\sqrt{2})/2$ | $(1+\sqrt{2})/2$ | |
| I(norm.) | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | Stokes-Patameter nach Gl.8 |
| S/I | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | - 1 | |
| C/I | 0 | 0 | 1 | - 1 | 0 | 0 | |
| M/I | 1 | - 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | |

Die Polarisationszustände S/I, M/I und C/I wurden mit einer drehbaren λ/4-Platte und feststehendem Analysator gemessen. Zur Beschreibung dieses Verfahrens wird ein xy-Koordinationssystem in der Ebene senkrecht zur optischen Achse eingeführt, dessen x-Achse in Richtung des einfallenden Ionenstrahls weist (Abb. 3.7). Die λ/4-Platte besitzt eine schnelle Achse x' (größere Phasengeschwindigkeit) und senkrecht dazu eine langsame Achse p'. Diese Achsen können gegenüber dem xy-System um den Winkel $\alpha$ gedreht werden. Der Analysator steht fest unter $45^{\circ}$ zur x- und y-Achse des Koordinationssystems. Die Komponenten des Vektors des elektrischen Feldes des Lichts, das an der λ/4-Platte auftrifft, sind

$$\begin{aligned} E_x &= a_x \cdot e^{-iwt} \\ E_y &= a_y \cdot e^{i(\varphi - wt)} \end{aligned} \qquad (3.1)$$

Darin sind die Amplituden $a_x$ und $a_y$ reell. Der Winkel $\varphi$ beschreibt hier die Phasenverschiebung zwischen den beiden Komponenten. Die Intensität dieses Lichts ist

$$I = |E_x|^2 + |E_y|^2 = a_x^2 + a_y^2 \qquad (3.2)$$

In Tabelle 3.1 sind $a_x$ und $a_y$ für vier reine lineare und zwei reine zirkulare Polarisationszustände angegeben. Die Symbole beziehen sich dabei auf die Bewegung der Spitze des elektrischen Feldvektors im Koordinationssystem von Abb. 3.7. Die Intensität ist auf 1 normiert ($a_x^2 + a_y^2 = 1$). Die Projektionen der Komponenten $E_x$ und $E_y$ von Gl. 3.1 beim Auftreffen auf die Achsen x' und y' der um $\alpha$ gedrehten λ/4-Platte sind:

$$\begin{aligned} E_x^{\alpha} &= E_x \cdot \cos\alpha + E_y \cdot \sin\alpha \\ E_y^{\alpha} &= E_x \cdot (-\sin\alpha) + E_y \cdot \cos\alpha \end{aligned} \qquad (3.3)$$

Beim Austritt ist die Welle in y'-Richtung zeitlich um $\pi/2$ gegenüber der Welle in x'-Richtung verzögert:

$$E^{\alpha}_{x'} = E^{\alpha}_{x} \cdot \cos\alpha + E^{\alpha}_{y} \cdot \sin\alpha$$
$$E^{\alpha}_{y} = [E^{\alpha}_{x} \cdot (-\sin\alpha) + E^{\alpha}_{y} \cdot \cos\alpha]\, e^{i\pi/2} \qquad (3.4)$$

Diese Komponenten treffen auf den feststehenden Analysator. Beim Austritt aus dem Analysator lautet die Amplitude:

$$E_{\alpha} = E^{\alpha}_{x'} \cos(45^{\circ}-\alpha) + E^{\alpha}_{y} \sin(45^{\circ}-\alpha)$$
$$= E^{\alpha}_{x'} \frac{\sqrt{2}}{2} (\cos\alpha+\sin\alpha) + E^{\alpha}_{y'} \frac{\sqrt{2}}{2} (\cos\alpha-\sin\alpha) \qquad (3.5)$$

Die Intensität ist:

$$I_{\alpha} = E_{\alpha} \cdot E_{\alpha}^{*} \qquad (3.6)$$

Mit Gl. 3.1, 3.3 und 3.4 ergibt sich daraus nach einigen Umformungen:

$$I_{\alpha} = a_x^2 \cdot \frac{1}{2} (1 + \frac{1}{2} \sin 4\alpha) +$$
$$+ a_y^2 \cdot \frac{1}{2} (1 - \frac{1}{2} \sin 4\alpha) + \qquad (3.7)$$
$$+ a_x a_y \cdot (\cos 2\alpha \sin\varphi + \sin^2 2\alpha \cos\varphi)$$

Setzt man die Werte für $a_x$, $a_y$ und $\varphi$ aus Tab. 3.1 in Gl. 3.7 ein, so ergeben sich für fünf verschiedene Werte $\alpha$ die ebenfalls in Tab. 3.1 angegebenen Intensitäten $I_{\alpha}$ hinter dem Analysator.

Durch Kombination der $I_{\alpha}$-Werte für verschiedene Winkel $\alpha$ lassen sich die Lichtstärke I und die Stokes-Parameter S/I, C/I und M/I angeben:

$$
\begin{aligned}
I &= I_o + I_{90} \\
S/I &= \frac{I_o - I_{90}}{I_o + I_{90}} \\
C/I &= \frac{2\, I_{45}}{I_o + I_{90}} - 1 \\
M/I &= \frac{2(I_{22.5} + I_{112.5} - I_{45})}{I_o + I_{90}} - 1
\end{aligned}
\qquad (3.8)
$$

Die Bedeutung dieser Größen ist aus Tabelle 3.1 ersichtlich. S/I beschreibt die Zirkularpolarisation, M/I die Linearpolarisation in x- und y-Richtung, C/I die Linearpolarisation unter $\pm$ 45° zur x- und y-Richtung. Die Ergebnisse von Gl.3.8 wurden experimentell dadurch geprüft, daß durch einen zusätzlichen Linearpolarisator bzw. einen Rechtszirkularpolarisator Licht mit reinen Polarisationszuständen erzeugt wurde. Die Meßanordnung ergab für diese Zustände mit Gl. 3.8 die richtigen, in Tab. 3.1 unten angegebenen Werte.

Zur Untersuchung der Zirkularpolarisation S/I genügt es nach Gl. 3.8, die Lichtstärken $I_o$ und $I_{90}$ hinter dem Analysator zu messen. Zur Bestimmung von C/I und M/I sind zusätzliche Messungen bei $\alpha$ = 45°, 22.5° und 112.5° notwendig. Diese Meßwerte wurden als Zählraten vom Photomultiplier-Impulszähler ausgedruckt und mit einem programmierbaren Taschenrechner in Lichtstärke und Polarisationswerte nach Gl. 3.8 umgerechnet.

Die $\lambda/4$-Platte wird auf folgende Weise justiert:

1. Der Linearpolarisator wird parallel zur x-Achse gestellt.
2. Ein zusätzlicher Linearpolarisator wird gekreuzt vor dem ersten Linearpolarisator (Analysator) aufgestellt.
3. Zwischen diesen beiden Polarisatoren wird jetzt die $\lambda/4$-Platte gestellt. Wenn deren schnelle oder auch langsame Achse parallel zur Schwingungsrichtung des auf

sie auftreffenden Lichts steht (also zur Richtung des zusätzlichen Linearpolarisators), so ist die Lichtstärke hinter dem Analysator gleich Null. Dadurch wird die Stellung $\alpha = 0^{o}$ oder $\alpha = 90^{o}$ der $\lambda/4$-Platte definiert. Der zusätzliche Linearpolarisator wird danach wieder entfernt. Die Entscheidung, ob dabei $\alpha = 0^{o}$ oder $\alpha = 90^{o}$ ist, wird mit Hilfe des Rechtszirkularpolarisators getroffen.

## 3.4 OBERFLÄCHENANALYSE MIT ELEKTRONEN NIEDRIGER ENERGIE

Die Reaktion der (110)-Oberfläche des 60/40-NiFe-Kristalls mit Sauerstoff wurde mit verschiedenen Oberflächen-empfindlichen Techniken untersucht:

a) Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES) mit einem zylindrischen Spiegel-Analysator (cylindrical mirror analyser, CMA). Dabei werden monoenergetische Elektronen von i.a. 2 keV auf die Oberfläche des geerdeten Targets geschossen, die dort sowohl aus den Substrat-Atomen wie auch aus adsorbierten Fremdatomen Augerelektronen auslösen. Diese Augerelektronen werden als charakteristische Linien auf dem Untergrund der "wahren" Sekundärelektronen im elektronisch differenzierten Energiespektrum identifiziert.

b) AES mit Hilfe eines Gegenfeld-Analysators (retarding field analysator, RFA). Dieser Analysator ist identisch mit der LEED-Apparatur (siehe c), die dazu in der RFA-Betriebsart benutzt wird. Dadurch besteht die Möglichkeit, ohne Veränderung der Lage des Targets zur LEED-Apparatur und damit bei gleichbleibender Auger-Nachweis-Empfindlichkeit mit LEED-Bildern korrelierte Auger-Signale zu erhalten. Durch Sekundärelektroneneffekte an

den Gittern war die RFA-Methode nur für Auger-Elektronenenergien über ca. 4oo eV verwendbar, was jedoch für den Nachweis der Sauerstoff-51o eV-Linie genügte.

c) Beugung niederenergetischer Elektronen (low energy electron diffraction, LEED). Dabei trifft ein monoenergetischer Elektronenstrahl von 3o - 3oo eV senkrecht auf die Oberfläche; die Beugungs-Interferenzmuster der elastisch reflektierten Elektronen werden auf einem Bildschirm beobachtet und erlauben Aussagen über Periodizitäten und Symmetrien des Grundgitters und von Adsorbaten.

d) Austrittsarbeitsmessung nach der Gegenspannungs-Methode (15,16): Das Target wird mit monoenergetischen Elektronen (U = 15 eV) aus der LEED-Kanone beschossen, wobei nach der Schaltung in Abb. 3.8 eine Gegenspannung $U_G$ an das Target gelegt und der Targetstrom $I_T$ gemessen wird. Das Potentialschema in Abb. 3.9 zeigt: Der Targetstrom wird dann unterdrückt, wenn die Gegenspannung $U_G$ so hoch wird, daß sich das Vakuumniveau des Targets auf derselben Höhe wie das Vakuumniveau der Kathode befindet:

$$U + \phi_K = U_G + \phi_T$$

Darin sind $\phi_K$ bzw. $\phi_T$ die Austrittsarbeiten der Kathode bzw. des Targets. Da $\phi_K$ nicht bekannt ist, kann mit dieser Methode nur die Änderung $\Delta\phi_T$ der Austrittsarbeit des Targets bestimmt werden.

Die Abhängigkeit des Targetstroms $I_T$ von Gegenspannung U für eine reine und eine mit 3 L Sauerstoff bedeckte Oberfläche zeigt Abb. 3.1o. Der Abfall des Stroms ist bei der sauerstoffbedeckten Oberfläche um o.5 V parallel verschoben. Daraus folgt, daß sich die Austrittsarbeit durch die Sauerstoffbedeckung um $\Delta\phi$ = o.5 V erhöht hat.

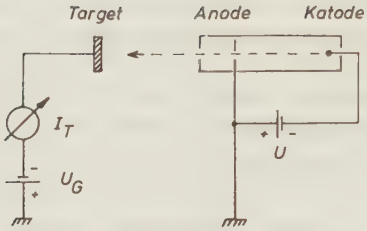



Abb. 3.8 : Gegenspannungsmethode zur Austrittsarbeits-
bestimmung

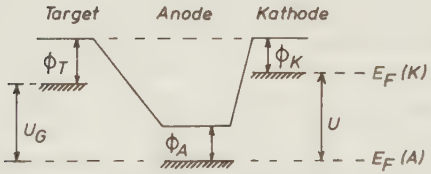



Abb. 3.9 : Potentialschama zur Gegenspannungsmethode

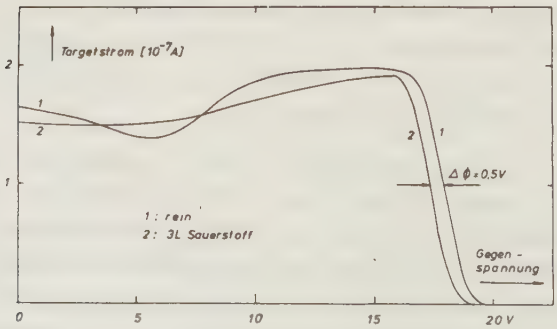



Abb. 3.10 : Targetstrom als Funktion der Gegenspannung

Diese Differenz wird in der Praxis so gemessen, daß der Targetstrom durch Nachregeln der Spannung $U_G$ im steilen Abfall der Kurve bei $I = 1 \cdot 10^{-8}$ A konstant gehalten wird. Dann gilt:

$$\Delta\phi_T = \Delta U_G \mid I_T = \text{const.}$$

# 4. REAKTION DER 6o/4o-NiFe-(11o)-OBERFLÄCHE MIT SAUERSTOFF

## 4.1 BISHERIGE UNTERSUCHUNGEN AN NiFe-LEGIERUNGEN

Die Reaktion von NiFe-Oberflächen mit Sauerstoff wurde an polykristallinen (17-21) und einkristallinen Proben (22-25) untersucht. Die Adsorption von Schwefel wurde auf einkristallinen NiFe-Oberflächen studiert (26).

Bei den Untersuchungen der Anfangsphasen der Reaktion einkristalliner Proben mit Sauerstoff handelte es sich jeweils um (1oo)-Oberflächen: Die Oxidation einer 76/24-NiFe-(1oo)-Oberfläche wurde mit XPS und LEED (22,23), die Oxidation einer 59/41-NiFe-(1oo)-Oberfläche wurde mit AES und LEED studiert (23).

Im folgenden wird die Untersuchung der Oxidation einer 6o/4o-NiFe-(11o)-Oberfläche mit LEED, AES und Messung der Austrittsarbeitsänderung beschrieben. Als Maß für die Sauerstoffdosis p · t wird die Einheit 1 Langmuir = 1 L = $1o^{-6}$ Torr · s verwendet. Die Sauerstoff-Bedeckung wird in Monolagen, bezogen auf die Flächendichte der Metallatome in der ersten Atomebene ($1.13 \cdot 1o^{15}$ Atome/$cm^2$) angegeben.
Die Ergebnisse werden mit dem Verhalten gegenüber Sauerstoff der (1OO)-59/41-NiFe-Oberfläche und mit anderen, verwandten Oberflächen verglichen.

Als Mittel zur Aufklärung vieler Beobachtungen dient dabei die Positionsbestimmung der Sauerstoffatome in der anfänglichen Chemisorptionsphase durch die Ionen-Oberflächengitterführung (Abs. 7).

## 4.2 AUGER-SPEKTROSKOPIE DER OBERFLÄCHE

Im folgenden werden Ergebnisse der Auger-Spektroskopie diskutiert. Das CMA-Auger-Spektrum der reinen (11o)-6o/4o-Ni-Fe-Oberfläche ist in Abb. 4.1 dargestellt. Es werden sowohl von Fe als auch von Ni die MVV-Übergänge bei 46.5 eV bzw. 61 eV und die LVV-Übergänge bei 598 eV, 651 und 7o3 eV bzw. 716 eV, 783 eV und 848 eV beobachtet. Nach Ergebnissen von Greco et al. (24) liegt an der Oberfläche eines (1oo)-59/41-NiFe-Kristalls innerhalb von 2 % dasselbe Verhältnis zwischen Ni und Fe vor wie im Inneren des Kristalls.
Eine wesentliche Abweichung von diesem Verhalten wird hier bei der (11o)-Oberfläche nicht angenommen. Verunreinigungen (S: 15o eV; Cł: 18o eV; C: 272 eV; O: 51o eV) sind 5 min nach der Reinigung im Rahmen der Nachweisempfindlichkeit (= 1/2o Monolage) nicht zu erkennen.

Im niederenergetischen Teil des Augerspektrums (2o-8o eV) treten bei den MVV-Übergängen bei Sauerstoffbedeckung starke Veränderungen auf. Dies ist in Abb.4.2A gezeigt. Bei einer Bedeckung von 1/3 Monolage sind Form und Lage der Fe-46.5 eV-Linie und der Ni-61 eV-Linie noch unverändert. Die Intensität geht jedoch auf die Hälfte zurück (Abb.4.2Ab). Dieser Rückgang wird durch die geringe Ausdringtiefe dieser Elektronen verursacht, die durch die Sauerstoffatome absorbiert werden.
Bei Bedeckungen C > o.4 treten neue Linien bei 42.5 eV, 53 eV und 58 eV auf. Gleichzeitig werden die Fe-46.5 eV- und die Ni-61 eV-Linie schwächer. Die neuen Linien können mit Hilfe

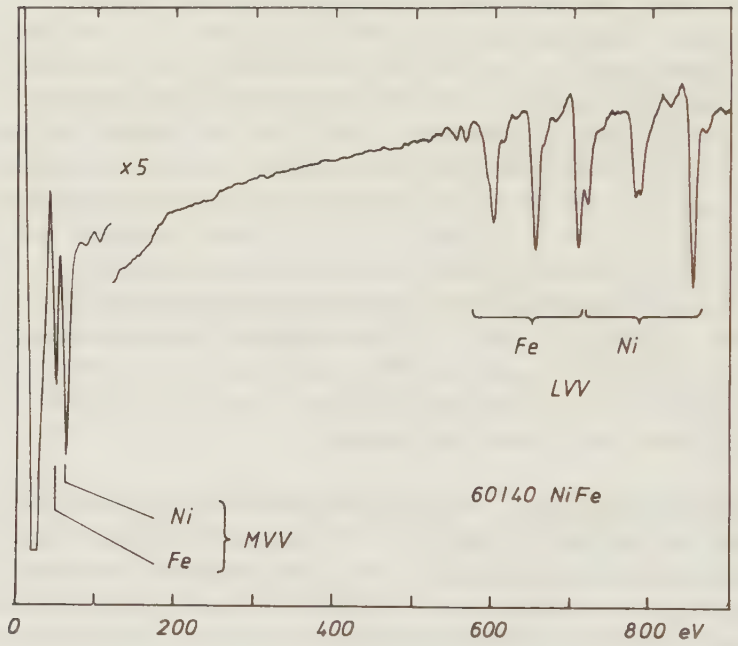



Abb. 4.1 : AES - Spektrum der reinen 60/40 - NiFe - Oberfläche

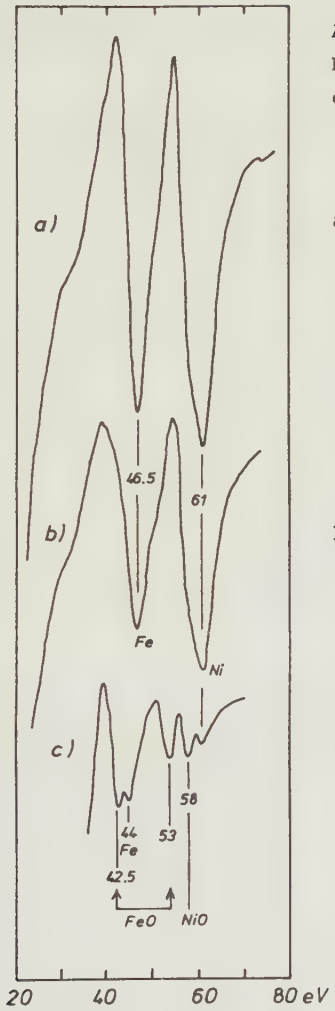



Abb. 4.2 A :
Niederenergetischer Teil
des AES - Spektrums :

a) reine Oberfläche

b) C = 1/3 Monolage
( 3 L )

c) C = 1.35 Monolagen
( $2 \cdot 10^{-6}$ Torr ·
73 min = 8760 L )

von AES-Messungen von Wandelt (18) identifiziert werden, der das Auger-Elektronenspektrum von polykristallinen Nickel-Eisen-Legierungen verschiedener Zusammensetzung bei Sauerstoffaussetzungen von 6oo L - $3 \cdot 1o^5$ L untersucht hat. Diese Messungen ergaben, daß sich die 46.5 eV-Linie einer reinen Eisenprobe bei Oxidation in zwei Linien bei etwa 41 eV und 5o eV aufspaltet und sich die 61 eV-Linie einer reinen Ni-Probe nach 58 eV verschiebt. Diese Veränderungen wurden auch auf einer polykristallinen 6o/4o-NiFe-Probe gefunden. Sie treten für C > o.4 auch bei der hier untersuchten NiFe-Probe auf. Das bedeutet, daß bei diesen Bedeckungen sowohl die Eisen- als auch die Nickelatome an der Bildung eines oxidischen Zustands beteiligt sind. Brundle et al. (22) haben die Oxidation einer 76/24-NiFe-(1oo)-Oberfläche mit XPS untersucht. Sie fanden bei Sauerstoffaussetzungen um 1oo L ebenfalls oxidische Zustände sowohl von Ni als auch von Fe.

Das Anwachsen der 53 eV-FeO-Linie als Funktion der Bedeckung wird ausführlich in Abs. 4.9 im Zusammenhang mit den Strukturbestimmungen diskutiert.

Die Veränderungen im hochenergetischen Teil des Auger-Spektrums (4oo eV - 9oo eV) bei Sauerstoffbedeckung sind in Abb. 4.2B a-c dargestellt. Die Höhe der Linien der LMM-Übergänge von Eisen und Nickel geht bei 1.2 ML auf etwa die Hälfte zurück. Das Verhältnis der Linienhöhen $Ni_{848}/Fe_{703}$ ist bei der reinen Oberfläche ( Abb. 4.2B a ) gleich 1.5O, bei C = 1.2 Ml ( Abb. 4.2B c ) gleich 1.25 . Derselbe Rückgang in diesem Verhältnis wurde bei Raumtemperatur von Greco et al. (24) auch auf der (1oo)-59/41-NiFe-Oberfläche gefunden. Dieser Rückgang läßt auf eine geringe Anreicherung von Eisenatomen in der Oberfläche bei Oxidation schließen. Diese Anreicherung ist bei Temperaturen um 8oo K wesentlich stärker ausgeprägt (17.24).

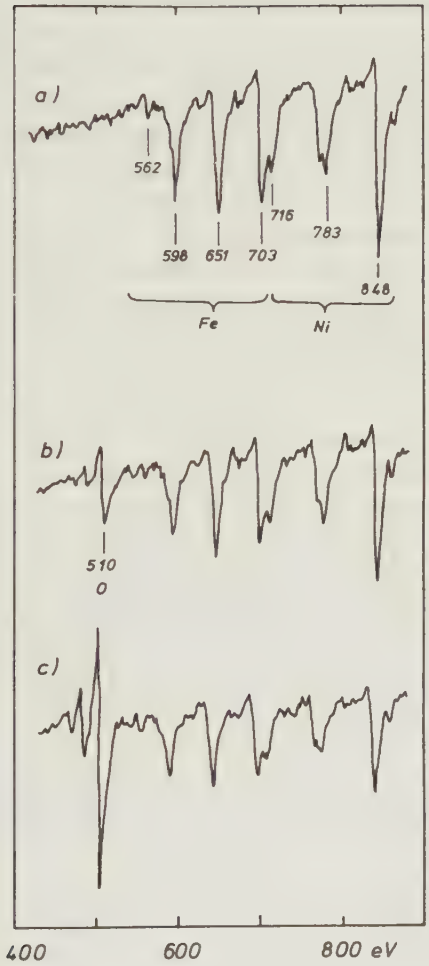



Abb. 4.2 B :
Hochenergetischer Teil des AES - Spektrums :

a) reine Oberfläche

b) C = 1/3 Monolage
( 3 L )

c) C = 1.2 Monolagen
( 1000 L )

Bei 510 eV wächst bei Sauerstoffbedeckung die O-KLL-Linie an (Abb.4.2B b). Die Höhe dieser Linie wurde mit der nachstehend beschriebenen Eichung als Maß für die Sauerstoff-Bedeckung verwendet. Dies setzt voraus, daß die Sauerstoff-Atome nicht unterhalb der Oberfläche eingebaut werden, da in diesem Fall der Beitrag dieser Atome zur Linienhöhe durch Absorption der Augerelektronen an den Metallatomen vermindert wäre. Eine solche Inkorporation wurde jedoch bis zur Bedeckung von 1.2 Monolagen nicht gefunden.
Spektren wie in Abb.4.2B wurden auch mit der LEED-Apparatur in RFA-Betriebsweise erhalten. Durch Umschalten der Steuer-Elektronik kann die entsprechende LEED-Struktur beobachtet werden. Dadurch wurde gefunden, daß der gut beobachtbare Rückgang des Haftkoeffizienten bei ca. 3 L (siehe Abs. 4.4.1 und Abb. 4.5) mit dem Auftreten der p(3 x 1)-Struktur verbunden war. Dieser p(3 x 1)-Struktur wurde die Bedeckung C = 1/3 Monolage zugeordnet. Diese Zuordnung ist wegen der monotonen Folge p(4 x 1), p(3 x 1) und p(2 x 1) der LEED-Strukturen (Abb. 4.4) plausibel, die auf einen immer kleiner werdenden Sauerstoffabstand in [1$\bar{1}$o]-Richtung schließen läßt. Die sich in dieser Eichung ergebenden Sauerstoff-Bedeckungen sind auch bei größeren Aussetzungen in guter Übereinstimmung mit Strukturmodellen, die u.a. aus den LEED-Beobachtungen abgeleitet wurden (Abs. 4.5 und 4.6).
Aus dem Verhältnis der Höhe der 51o-eV-Linie des Sauerstoffs zur Höhe der 65o eV-Linie des Eisens ergibt sich bei einer Bedeckung C = 1/3 Monolage die Beziehung

$$C = 0.45 \cdot \frac{O_{510}}{Fe_{650}}$$

Für andere Bedeckungen kann diese Beziehung nur als Abschätzung dienen, da die Eisen-Linie durch die Sauerstoffbedeckung geschwächt wird.

## 4.3 LEED-STRUKTUREN

Um Aufschluß über laterale Ordnungszustände der Sauerstoffatome bei zunehmender Bedeckung zu erhalten, wurde die Oberfläche mit der Methode der Beugung langsamer Elektronen (LEED) untersucht. Die LEED-Strukturen wurden i.a. bei Elektronen-Einschußenergien von 9o eV beobachtet. Beispiele für photographische Aufnahmen sind in Abb. 4.3 gezeigt. Schematisch sind die Strukturen in Abb. 4.4 wiedergegeben. Ohne Sauerstoff-Bedeckung erhält man ein scharfes, kontrastreiches Bild des reziproken Gitters der unrekonstruierten (11o)-fcc-Oberfläche (Abb. 4.4a), wobei die Richtung der längeren Seite der rechteckigen Einheitszelle im Beugungsbild der dichtgepacktesten Richtung ([1$\bar{1}$o]) in der Oberfläche entspricht.

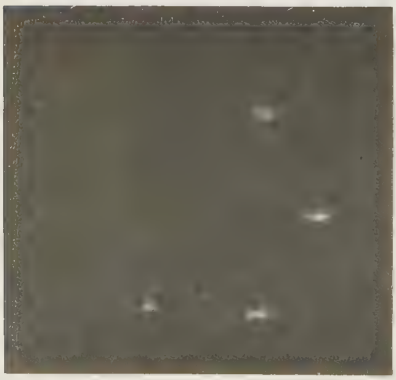
Nach einer Sauerstoff-Dosis von etwa o.3 L, die einer Bedeckung von o.1 Monolagen entspricht, sind zwischen den Substratreflexen in [1$\bar{1}$o]-Richtung schwache Streifen erkennbar (Abb. 4.4b), die in [oo1]-Richtung um etwa 1/1o des Abstands der Substratreflexe verbreitert sind. Die Streifenbildung läßt darauf schließen, daß sich unter den adsorbierten Sauerstoffatomen schon bei dieser Bedeckung in [oo1]-Richtung die Periodizität des Grundgitters einstellt. Das heißt, daß sich in [oo1]-Richtung Ketten bilden, die in [1$\bar{1}$o]-Richtung einen großen (im Mittel 1o Gitterkonstanten) und unregelmäßigen Abstand haben. Die Kettenbildung weist auf anziehende Kräfte unter den Sauerstoffatomen in [oo1]-Richtung hin. Die Verbreiterung der Streifen in [oo1]-Richtung bedeutet, daß die Ketten unterbrochen sind, so daß bereits bei diesen Bedeckungen der Anlaß für eine Domänenbildung gegeben ist.

p (1x1)

1/3<C<0.4

p (2x1), C = 0.4

p (2x1), C = 0.5



hexagonale Struktur

Abb. 4.3 :
LEED - Bilder ,
Photographien

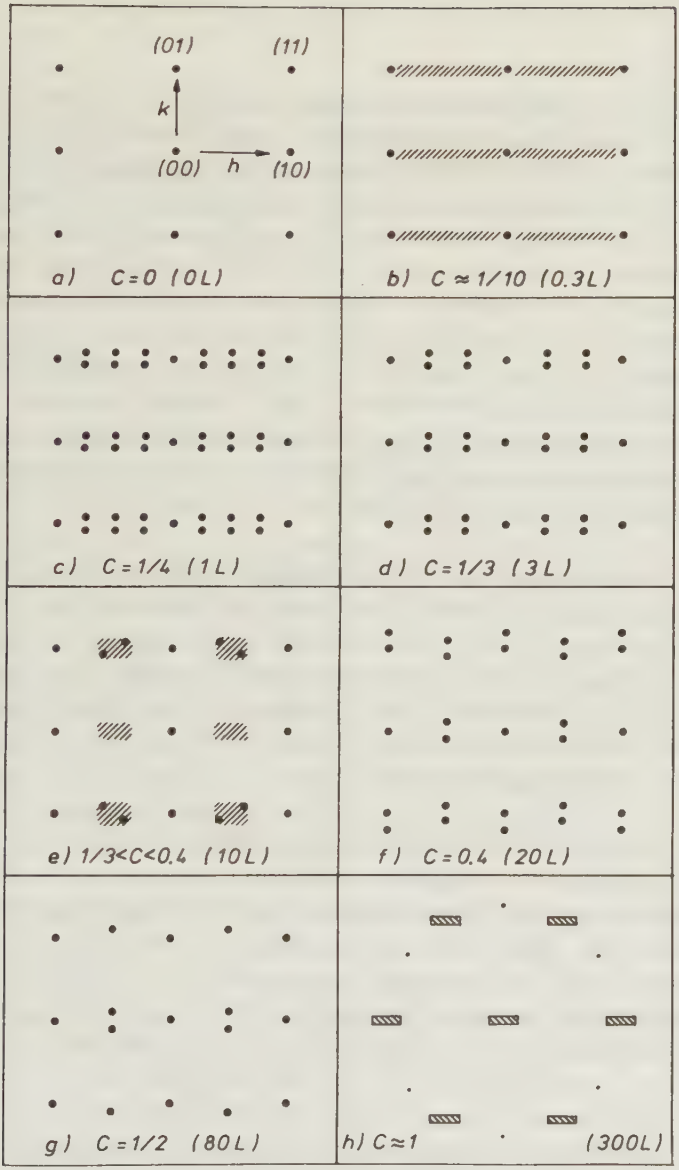



Abb. 4.4 : LEED - Bilder , schematisch

Bei Erhöhung der Sauerstoffdosis auf etwa 1 L bilden sich aus den Streifen diskrete Punkte, deren Abstand in [1$\bar{1}$0]-Richtung 1/4 des Abstandes der Substratreflexe beträgt (Abb. 4.4c). Diese Überstruktur wird mit p(4 x 1) bezeichnet, da sich ihre Einheitszelle aus dem vierfachen bzw. einfachen Gittervektor der primitiven, rechteckigen Einheitszelle des Substrats ergibt. Sie entspricht einer Bedeckung von 1/4 Monolage. Die gleichen Abstände in [1$\bar{1}$0]-Richtung von vier Gitterkonstanten müssen von abstoßenden Kräften erzwungen worden sein, die in dieser Richtung unter den Sauerstoffatomen wirken. Anziehende Kräfte würden dagegen, wie bei der [001]-Richtung, zu Ketten mit einem Abstand von 1 Gitterkonstante bzw. zu Inselbildung führen.

Die Reflexe der p(4 x 1)-Überstruktur sind in [001]- Richtung verdoppelt. Diese Aufspaltung ist schon in der Verbreiterung der Streifen angedeutet, die bei $\Theta < 1/4$ auftreten und bleibt auch in den anschließenden LEED-Strukturen bis zu einer Bedeckung $\Theta = 1/2$ erhalten. Sie wird von einer Domänenbildung verursacht, die anhand der p(2 x 1)-Struktur näher untersucht wird (Abs. 4.5).

Bei weiterer Erhöhung der Sauerstoffdosis ($p \cdot t = 3$ L) tritt eine p(3 x 1)-Überstruktur auf, die wieder in [001]-Richtung um 1/10 des Abstands der Substratreflexe aufgespalten ist (Abb. 4.4d). Diese Struktur entspricht einer Bedeckung von 1/3 Monolage (vergl. Abs. 4.2). Bei Erhöhung der Bedeckung ziehen sich diese Reflexe kontinuierlich zusammen (Abb. 4.4e), bis sich bei $\Theta = 0.4$ Monolagen (20 L) eine aufgespaltene p(2 x 1)-Struktur ergibt (Abb. 4.4f). Dabei sind Satelliten bei den Substratreflexen zu beobachten. Bis zu einer Aussetzung von 8 L ($\Theta = 0.5$) ändern sich nur noch die relativen Intensitäten der Reflexe (Abb. 4.4g). Die LEED-Strukturen (Abb. 4.4 f und g) werden in Abs. 4.5.4 und 4.5.4 eingehend diskutiert. Bei Bedeckungen $p \cdot t > 80$ L

tritt eine diffuse, hexagonale Struktur auf (Abb. 4.4 h), wobei die p(2 x 1)-Struktur allmählich verschwindet. Zusätzlich werden scharfe Reflexe beobachtet, die der um $30^{\circ}$ gedrehten, hexagonalen Struktur entsprechen. Diese Strukturen werden in Absatz 4.6 besprochen.

## 4.4 SAUERSTOFFBEDECKUNG BEI C ≤ 1/3 MONOLAGE

Die Zunahme der Sauerstoffbedeckung wurde durch die Höhe der 51o eV-O-Augerlinie als Funktion der Sauerstoff-Dosis $p \cdot t$ (in $1o^{-6}$ Torr · s = 1 L) gemessen. Die Auger-Linienhöhe wird nach den anschließenden Überlegungen in Bedeckungen C (Monolagen) geeicht. Für zwei Druckwerte $p = 4 \cdot 1o^{-9}$ Torr und $p = 1o^{-8}$ Torr sind die Ergebnisse für $p \cdot t \leq 4.5$L in Abb. 4.5 dargestellt. Die schnelle Zunahme der Bedeckung am Anfang der Aussetzung geht bei etwa 2 L in eine Sättigung über. Danach nimmt die Bedeckung weiter langsam zu. In Abb. 4.5 wurden diejenigen Dosiswerte bezeichnet, bei denen die jeweiligen LEED-Strukturen am deutlichsten zu beobachten waren. Die durchgezogene Kurve wurde nach Gl. 4.5 berechnet und mit Gl. 4.6 angepaßt.

Im folgenden werden diese Beziehungen hergeleitet. Dazu wird ein Modell für die Kinetik der Adsorption auf einem Adsorptionsplatz mit vierfacher Symmetrie (N auf (1oo)W) von King und Wells (27) für den hier vorliegenden Fall eines Adsorptionsplatzes mit zweifacher Symmetrie (kurze Brücke: siehe Abs. 7) abgeändert.

Für die Sauerstoff-Adsorption werden folgende Annahmen gemacht:

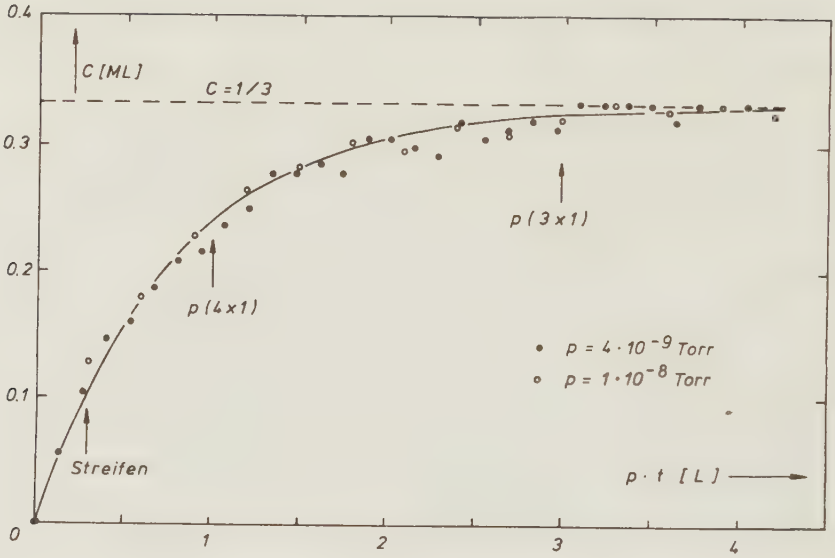



Abb. 4.5 : Sauerstoff - Bedeckungszunahme

1. Ein Sauerstoffatom wird in der kurzen Brückenposition adsorbiert. Dies ist ein Ergebnis aus den Ionenstreu-Experimenten (Abs. 7). Dabei ist es an die zwei darunterliegenden Substratatome (Ni oder Fe) gebunden (Abb.4.6a).

2. Diese Substratatome können keine weiteren Sauerstofatome mehr binden. Dadurch sind z.B. die Adsorptionsplätze a, c und d in Abb.4.6b blockiert, die Plätze b sind besetzbar.

3. Die adsorbierten Sauerstoffatome sind auf der Oberfläche so beweglich, daß sie sich entsprechend den unter ihnen wirksamen anziehenden und abstoßenden Kräften in der energetisch günstigsten Lage anordnen können. Die Zeit, in der sie sich während eines Platzwechsels nicht in der kurzen Brückenposition befinden, soll vernachlässigbar klein sein.

4. Die Sauerstoffatome stoßen sich gegenseitig in [1$\bar{1}$o]-Richtung ab. Daher versuchen sie, den gleichen Abstand voneinander zu erreichen. Bei Bedeckungen $1/n > C > 1/n+1$ ($n = 3,4,5...$) stellt sich eine Mischung aus n-fachen und (n + 1)-fachen Gitterabständen ein.

5. Die Sauerstoffatome ziehen sich in [oo1]-Richtung an und bilden schon bei kleinen Bedeckungen ($C = 1/1o$) Ketten (Kondensation). Die Störung bei der Kettenbildung, die zur Aufspaltung der LEED-Reflexe führt (Abs. 4.3) wird hier vernachlässigt.

6. Zwischen Sauerstoffatomen, die sich in Diagonalstellung befinden (Abb.4.6c), überwiegen die abstoßenden Kräfte. Diese Annahme erklärt das Auftreten der p(2 x 1)-LEED-Struktur bereits bei $C = o.4$, sowie die Kompression des Abstands der Sauerstoffatome in [oo1]-Richtung bei $C = o.5$ (Abs. 4.5.2).

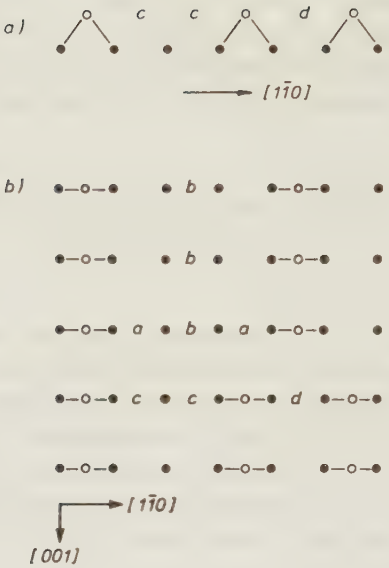
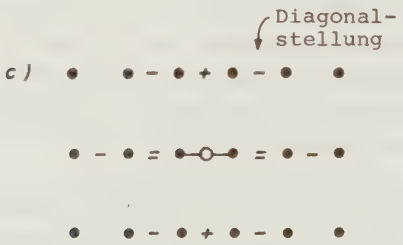



Abb. 4.6 : Adsorbierter Sauerstoff in der Ansicht
a) parallel zur Oberfläche
b) senkrecht zur Oberfläche




c) Vorzeichen der Kräfte zwischen adsorbierten Sauerstoff - Atomen

7. Sauerstoff-Moleküle können dann dissoziativ chemisorbiert werden, wenn sie auf zwei in [oo1]-Richtung nebeneinanderliegende, besetzbare Adsorptionsplätze treffen. Bei zwei in [1$\bar{1}$o]-Richtung nebeneinanderliegenden Adsorptionsplätzen besteht diese Möglichkeit wegen Punkt 2 nicht.

8. Die der Chemisorption oder der Reflexion des $O_2$-Moleküls vorausgehende Physisorption hat einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Adsorptionskinetik (Langmuir-Kinetik).

Für die Kräfte zwischen einem bereits adsorbierten Sauerstoffatom (O) und einem zweiten Sauerstoffatom ergeben sich für die Adsorptionsplätze der Umgebung zusammenfassend die in Abb.4.6c angegebenen Vorzeichen. Anziehende Kräfte werden durch das Pluszeichen, abstoßende Kräfte durch das Minuszeichen symbolisiert. Zwei Minuszeichen bedeuten starke abstoßende Kräfte. Der entsprechende Adsorptionsplatz wird nicht besetzt. Für die Diagonalstellung werden nach Abs. 4.5.2 abstoßende Kräfte angenommen.

Nach der dissoziativen Adsorption eines Moleküls stellt sich nach Annahme 3-5 wieder eine Gleichgewichtsanordnung ein. Wegen der Kettenbildung gehören zu jedem besetzbaren Adsorptionsplatz zwei in [oo1]-Richtung benachbart gelegene weitere besetzbare Adsorptionsplätze, so daß es im weiteren genügt, die Wahrscheinlichkeit für die Adsorption eines einzelnen Sauerstoffatoms anzugeben. Das zugehörige zweite Atom des Moleküls kann dann ebenfalls adsorbiert werden.

Da jedes Sauerstoffatom außer seinem eigenen Platz nach Annahme 2 auch die beiden in [1$\bar{1}$o]-Richtung benachbarten Plätze blockiert, ist die Haftwahrscheinlichkeit

$$s(C) = s_o \ (1 - 3\ C) \qquad (4.1)$$

Darin ist $s_o$ die Anfangshaftwahrscheinlichkeit bei unbedeckter Oberfläche. Der Platz d in Abb. 4.6b, der gleichzeitig durch zwei bereits adsorbierte Atome blockiert wird, kann bei einer kontinuierlichen Steigerung der Bedeckung von Null an nicht auftreten, da sich die Sauerstoffatome für $C \leq 1/3$ immer in einem Abstand $\geq 3$ Gitterkonstanten befinden (siehe Annahme 4) und die Haftwahrscheinlichkeit s in Gl. 4.1 für $C = 1/3$ zu Null wird.

Obwohl also $C = 1/2$ die nach Annahme 2 maximal mögliche Bedeckung ist, kann wegen den Gleichgewichtsbedingungen 4 und 5 nur $C = 1/3$ erreicht werden. Das Auftreten dieser Grenze wird als kinetische Blockierung der Adsorption (27) bezeichnet.

Die Zunahme der Sauerstoffbedeckung C mit der Dosis $p \cdot t$ ergibt sich aus

$$dC/d(p \cdot t) = s(C) \cdot r \ , \qquad (4.2)$$

wobei r die atomare Gas-Auftreffrate in Monolagen/Langmuir ist.

Aus der kinetischen Gastheorie ergibt sich die Molekül-Stoßrate $\nu$ $[(cm^2 \cdot s)^{-1}]$ zu

$$\nu = \frac{p}{\sqrt{2\ m\ k\ T}} \qquad [(cm^2 \cdot s)^{-1}] \ , \qquad (4.3)$$

wobei

m : Masse des Sauerstoff-Moleküls
(= $32 \cdot 1.672 \cdot 10^{-24}$ g)

k : Boltzmann-Konstante(= $1.38 \cdot 10^{-16}$ $\frac{g \cdot cm^2}{K \cdot s^2}$

T : absolute Temperatur (293 K)

p : Druck in $10^{-3}$ mbar ($10^{-3}$ mbar = 1 $\frac{g}{s^2 \cdot cm}$ )

Daraus folgt:

$$\nu \quad [(cm^2 \cdot s)^{-1}] = 2.71 \cdot 10^{20} \cdot p \ [mb]$$

Auf die Einheitszelle in der (110)-Oberfläche mit der Fläche $8.85 \cdot 10^{-16}$ $cm^2$ treffen damit

$$r = 0.639 \ \frac{\text{Monolagen}}{\text{Langmuir}} \qquad (4.4)$$

Sauerstoffatome auf.

Aus Gl. 4.1 und 4.2 folgt

$$\frac{dC}{d(p \cdot t)} = s_o (1 - 3\ C_{(p \cdot t)} \cdot r\ )$$

mit der Lösung

$$C_{(p \cdot t)} = \frac{1}{3} [1 - \exp (-3\ s_o r \cdot p \cdot t)]$$

$$C_{(p \cdot t)} = \frac{1}{3} [1 - \exp (-1.92 \cdot s_o \cdot p \cdot t)] \qquad (4.5)$$

wobei p·t im Langmuir eingesetzt wird. Eine Anpassung von Gl. 4.5 an die experimentellen Werte von Abb. 4.5 erfolgte durch Variation von $s_o$, wobei der Ordinatenmaßstab durch die in Abb. 4.5 eingezeichnete Asymptote bei C = 1/3 vorgegeben war. Die beste Anpassung wurde mit

$$s_o = 0.66 \pm 0.07 \qquad (4.6)$$

erhalten. Aus Gl. 4.5 geht hervor, daß dieser Wert direkt von der Genauigkeit der Druckmessung abhängt. Die Druckanzeige gibt den wahren Druck jedoch nur bis auf einen Faktor von etwa 1.5 genau an. Die Ursachen für diese Unsicherheit liegen in möglichen Veränderungen der Elektrodengeometrie(28) und, bei niedrigen Drücken, in der Elektronenstoß-Desorption (29).

## 4.5 SAUERSTOFFBEDECKUNG BEI $1/3 \leq C \leq 1/2$ MONOLAGE

### 4.5.1 Bedeckungszunahme

Wegen der im vorigen Abschnitt besprochenen kinetischen Blokkierung geht die Haftwahrscheinlichkeit bei Annäherung an die Bedeckung C = 1/3 stark zurück.
Dennoch ist eine weitere, sehr langsame, lineare Zunahme der Bedeckung im Experiment zu beobachten. Ein Beispiel dafür zeigt Abb. 4.7. Dabei wird bei dieser Messung die Steigung der Kurve und daher die Haftwahrscheinlichkeit plötzlich kleiner bei einer Dosis von 80 L, entsprechend einer Bedeckung von etwa C = 0.5 Monolagen. Die Bedeckung C = 1/2 entspricht der nach Punkt 2 des vorigen Abschnitts maximal möglichen Bedeckung, wenn die kinetische Blockierung bei C = 1/3 nicht wirksam wäre. Eine solche Verringerung der Haftwahrscheinlichkeit im Bereich $C \approx 1/2$ wurde in vielen Meßreihen bei Sauerstoff-Partialdrücken zwischen $10^{-8}$ Torr

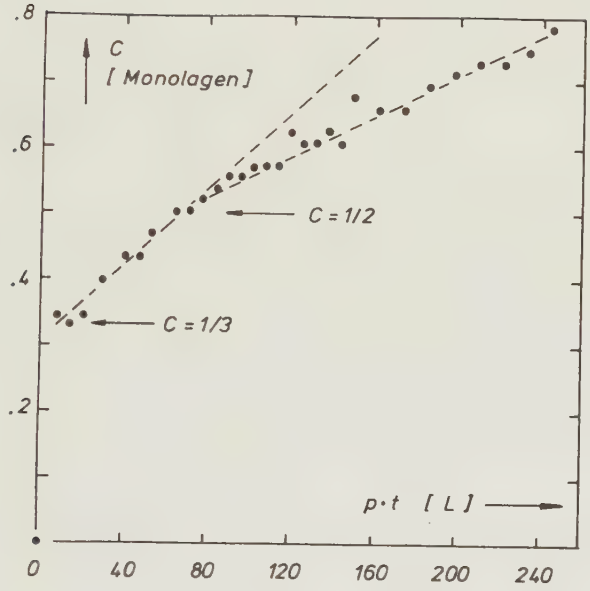



Abb. 4.7 : Sauerstoff - Bedeckungszunahme

und $1o^{-6}$ Torr beobachtet. Bei manchen Messungen war dabei der Knick in der Bedeckungskurve verrundet. Der zu C = 1/2 führende Wert der Sauerstoffdosis schwankte zwischen 4o L und 18o L. Diese Schwankung kann durch das folgende Adsorptionsmodell erklärt werden:

Das lineare Anwachsen der Bedeckung im Bereich $1/3 > C > 1/2$ beruht auf einer von der Bedeckung unabhängigen Anzahl von Haftstellen, die selbst nicht durch den im vorigen Abschnitt besprochenen Mechanismus kinematisch blockiert werden. Diese Haftstellen können z.B. Adsorptionsplätze an Oberflächenstufen sein. Auf solchen Plätzen kann die Adsorptionsenergie größer oder auch kleiner sein als auf Terrassenplätzen. Liegen die Stufenplätze energetisch höher als die Terrassenplätze, so ist die Diffusion eines auf dem Stufenplatz adsorbierten Atoms auf die Terrasse wahrscheinlicher als der umgekehrte Weg. Dadurch werden die Stufenplätze für die Adsorption neuer Atome aus der Gasphase freigehalten.

Die relative Häufigkeit dieser Haftstellen ist gleich dem Haftkoeffizienten s in diesem Bereich, der sich aus den experimentellen Werten für die Bedeckungszunahme und den Gln. 4.2 und 4.4 ergibt:

$$1.6 \cdot 1o^{-3} \leq s \leq 6.5 \cdot 1o^{-3} \text{ [Monolagen]}$$

Diese Werte können mit den Ergebnissen der Ionen-Streuexperimente verglichen werden.
In Abs. 6.3 wird gezeigt, daß die Oberfläche mit atomaren Stufen eines mittleren Abstands von 75 Atomabständen bedeckt ist. Betrachtet man eine Anordnung von Terrassen, die in $[1\bar{1}o]$- und [oo1]-Richtung jeweils l = 75 Atomabstände breit sind, so ergeben sich pro Terrasse an den beiden Kanten in $[1\bar{1}o]$-Richtung 75 Stufen-Adsorptionsplätze (kurze Brücke). Führt das Auftreffen eines Moleküls auf einen solchen Platz

mit der Wahrscheinlichkeit $s_o = 0.66$ (Gl. 4.6) zur Adsorption, so ergibt sich die Haftwahrscheinlichkeit s zu

$$s = s_o/l = 8.8 \cdot 10^{-3}$$

Dieser Wert verringert sich noch, wenn angenommen wird, daß die Terrassen auch durch die $[1\bar{1}2]$- und $[1\bar{\bar{1}}\bar{2}]$-Richtungen begrenzt sein können. Damit scheint die Deutung der Haftplätze als Stufenplätze plausibel.

Die unterschiedlichen Haftwahrscheinlichkeiten zwischen den einzelnen Messungen können auf Schwankungen der Stufendichte in dem Bereich zurückgeführt werden, der vom Elektronenstrahl der Auger-Elektronenkanone getroffen wird. Der Durchmesser dieses Strahls von 0.2 mm liegt in der Größenordnung der größten Komponente der Orangenhaut-Welligkeit von 0.1 mm (Abs. 3.1). Bei den Ionenstrahl-Experimenten, die zur Bestimmung der Stufendichte benutzt werden, werden solche lokale Unterschiede über den Durchmesser des Kristalls gemittelt. Daher wurde bei diesen Experimenten keine Streuung des mittleren Stufenabstands gefunden.

Der Einfluß von atomaren Stufen auf die Adsorptionskinetik wurde bei facettierten Oberflächen mit hoher Stufendichte an den Systmen $O_2$/W(11o) (3o,31), $N_2$/W(11o) (32) und $O_2$/Mo(11o) (33) untersucht. Die Ergebnisse werden mit Adsorption bzw. Dissoziation der Moleküle an den Stufen erklärt, von wo aus die Atome auf die Terrassen diffundieren. Diese Adsorption an Stufen ist bis zu einer Sättigungsbedeckung wirksam, die höher liegt als bei ungestuften Oberflächen. Bei $N_2$/(11o)W wird auf einer ungestuften Oberfläche überhaupt keine Adsorption gefunden. In diese Untersuchungen ordnet sich das hier gefundene Ergebnis für das System $O_2$/(11o) NiFe ein, wo durch Adsorption auf Terrassenplätzen nur eine Bedeckung von 1/3 Monolage erreicht wird, die durch Adsorption an Stufen bis 1.2 Monolagen anwächst.

Der Bereich 1/3<C<1/2 unterteilt sich nach den LEED-Strukturen und den Messungen der Austrittsarbeitsänderung (Abs. 4.8) in die zwei Bereiche 1/3<C<o.4 und o.4<C<1/2. Im ersten Bereich (3 L<p·t < 2o L) wird im LEED-Bild beobachtet, daß die aufgespaltenen Überstrukturreflexe der p(3 x 1)-Struktur sich kontinuierlich aufeinander zu bewegen, wobei auch zwischen den Reflexen eine diffuse Helligkeit sichtbar wird. Die Intensitätsverteilung wird dabei unsymmetrisch, wie die Abb. 4.3 und 4.4e zeigen. Bei einer Aussetzung von ca. 2o L hat sich daraus eine p(2 x 1)-Struktur gebildet, deren halbzahlige Reflexe in k-Richtung (Bezeichnung siehe Abb. 4.4a) um 1/6 - 1/5 des Reflexabstands in dieser Richtung aufgespalten sind. Bei den Substratreflexen mit k = $\pm$ 1, $\pm$ 3, $\pm$ 5 ... treten ein oder zwei Satelliten auf, deren Abstand zum Substratreflex gleich dem der aufgespaltenen halbzahligen Reflexe ist (k = 4/5; $\pm$ 6/5). Die Bedeckung bei der Aussetzung von 2o L ist C = o.4 und damit kleiner als die maximal mögliche Bedeckung C = 1/2 für eine vollständige p(2 x 1)-Struktur. In der anschließenden Phase o.4<C<o.5 (2o L < p·t < 8o L) verschwindet allmählich der innere der beiden aufgespaltenen p(2 x 1)-Überstruktur-Reflexe sowie die Substrat-Satelliten.

### 4.5.2 Modelle für die LEED-Strukturen bei C = o.4 und C = o.5

Charakteristisch für die p(2 x 1)-LEED-Strukturen zwischen C =o.4 und C=o.5 (Abb. 4.4f und g) ist die Aufspaltung der halbzahligen Überstruktur-Reflexe und das Auftreten von Satelliten bei den Substratreflexen. Bei den meisten Experimenten war bei C = o.4 jeweils ein Satellit zu einem Substratreflex zu beobachten. Bei einigen Beobachtungen trat zusätzlich ein am Substratreflex gespiegelter Satellit auf. Bei Steigerung der Bedeckung von C = o.4 auf C = o.5 verschwinden diese Satelliten und der jeweils innere Reflex der aufgespaltenen Reflexe um h = $\pm$ 1/2, k = $\pm$ 1 (h,k: siehe Abb. 4.4a).

Eine Erklärung dieser Aufspaltung ist durch die Annahme bandförmiger Domänen möglich, die sich in [1$\bar{1}$o]-Richtung erstrecken und im Mittel fünf Atomabstände in [oo1]-Richtung breit sind. Da die aufgespaltene p(2 x 1)-Struktur schon bei einer Bedeckung von o.4 Monolagen auftritt, wird angenommen, daß von den fünf möglichen Sauerstoffreihen eines Domänenbands zunächst nur vier besetzt sind. Dadurch wird nach Abs. 4.5.4 die Lage der Reflexe gegenüber C = o.5 nicht geändert. Ein reales Bild dieses Modells ist in Abb. 4.8a gezeigt. Die Sauerstoffatome befinden sich nach Abs. 7 in der kurzen Brückenposition. Auf die Domänengrenzen ist am Rand des Bildes gestrichelt hingewiesen. Es wurde angenommen, daß eine Sauerstoffreihe gerade auf der Domänengrenze fehlt. Die Adsorptionsplätze auf dieser Grenze zeichnen sich durch eine Diagonalstellung zu den Plätzen der angrenzenden Domäne aus. Mit der Annahme von abstoßenden Kräften zwischen Sauerstoffatomen in einer solchen Diagonalstellung (vergl. Abb. 4.7) kann erklärt werden, daß gerade diese Reihe zunächst unbesetzt bleibt.

Von Abb. 4.8a wurde mit der Lasermethode nach Abs. 4.5.4 das Beugungsbild Abb. 4.8b erzeugt. Die Aufspaltung der Sauerstoffreflexe bei h = $\pm$ 1/2, $\pm$ 3/2,... wird in Übereinstimmung mit der Rechnung von Abs. 4.5.4 und dem Experiment (Abb. 4.4f) wiedergegeben.

Bei einer Zunahme der Bedeckung von o.4 auf o.5 Monolagen müssen trotz der abstoßenden Kräfte auch die Adsorptionsplätze auf den Domänengrenzen besetzt werden. Nach Abs. 4.5.4 wäre dabei jedoch keine Intensitätsverschiebung zwischen den beiden aufgespaltenen Sauerstoff-Reflexen zu erwarten. Erst eine Verringerung des Abstands der Stauerstoffatome in [oo1]-Richtung, wie im Modell Abb. 4.9a, erzeugt eine Intensitätsverschiebung, die den inneren Reflex, wie im Experiment, zum Verschwinden bringt. Als Ursache für die Verringerung diesesAbstands können die abstoßenden Kräfte zwischen den Sauerstoffatomen an den Domänengrenzen angenommen werden.

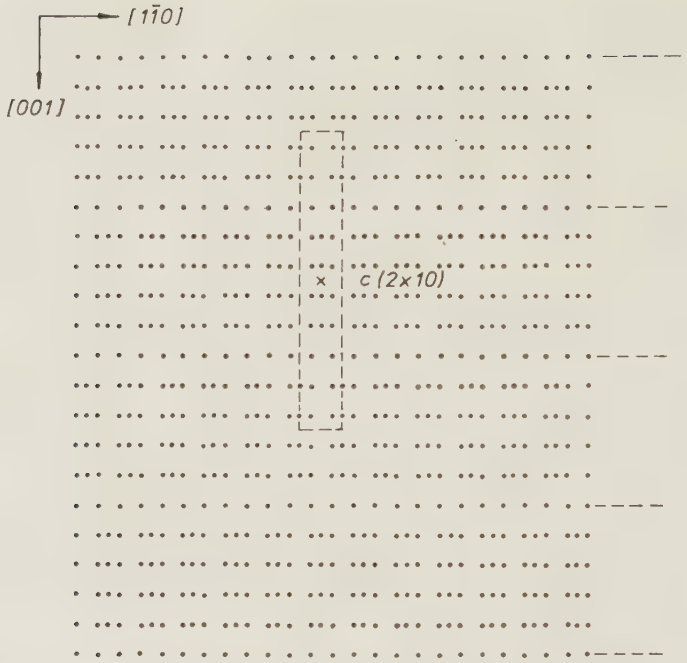
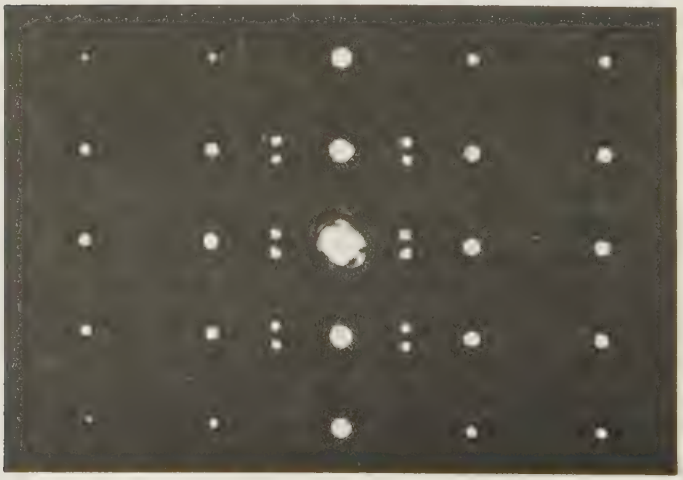



Abb. 4.8 a : Atomanordnung bei C = 0.4 Ml



b : Laser - Interferenzbild zu a)

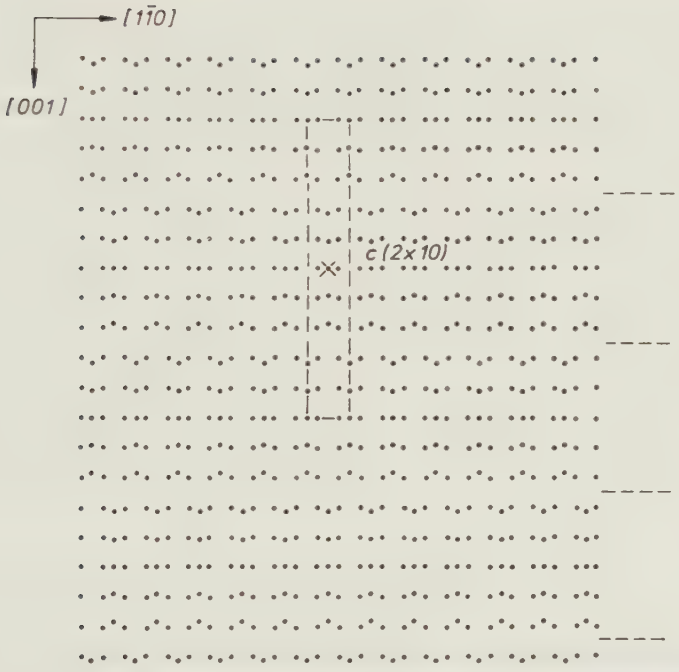
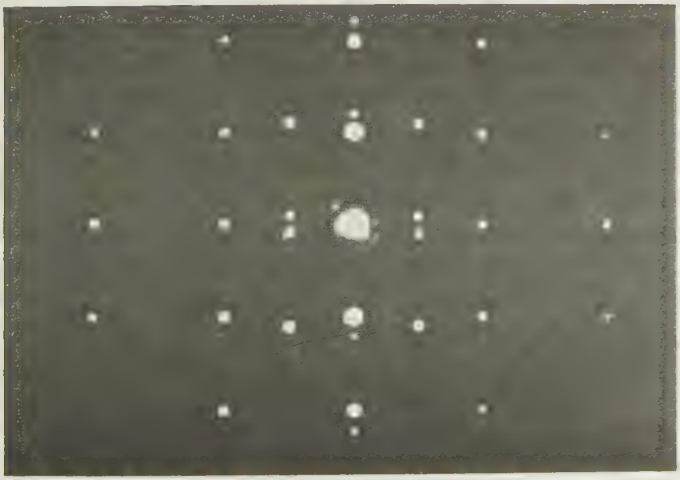



Abb. 4.9 a : Atomanordnung bei C = 0.5 Ml



b : Laser - Interferenzbild zu a)

Die Größe dieser Kompression kann lediglich abgeschätzt werden. Wenn vorausgesetzt wird, daß die Sauerstoffatome, wie harte Kugeln, mit konstanter Bindungslänge zu den Metallatomen bewegt werden können, so ergibt sich eine größte seitliche Verschiebung von o.137 nm. Dann berührt das Sauerstoffatom das Substratatom der 2. Ebene. Wenn beide Endatome einer [oo1]-Kette aus fünf Sauerstoffatomen um diesen Betrag aufeinander zu verschoben sind und sich dazwischen gleiche Abstände einstellen, so ergibt sich eine größtmögliche Kompression des Atomabstands in der Kette von 15 %. In Abb. 4.9a wurde eine Kompression von 1o % angenommen, wie auch für Abb. 4.11 im nächsten Abschnitt. Die aus der Brückenposition verschobenen Sauerstoffatome weisen einen oxidischen Bindungscharakter auf, wie an den niederenergetischen Augerlinien (Abs. 4.9) und am veränderten Dipolmoment (Abs.4.8) beobachtet wird.

Das Beugungsbild, das mit der Lasermethode nach Abs. 4.5.5 von Abb. 4.9a erzeugt wurde (Abb. 4.9b) zeigt das Verschwinden des inneren der aufgespaltenen Reflexe, sowie einen Satellit bei den Substratreflexen.

Die Strukturmodelle in Abb. 4.8a und Abb.4.9a erklären die Aufspaltung der Sauerstoff-Überstruktur-Reflexe, deren relative Intensitätsveränderung und das Auftreten der Satelliten bei den Substratreflexen. Von diesen Satelliten wird jedoch nur die Lage richtig beschrieben. Im Experiment treten Satelliten bereits bei C = o.4 auf, verschwinden jedoch bei C = o.5, im Gegensatz zum Modell, wo dieses Verhalten umgekehrt ist. Es wird angenommen, daß dieser Unterschied auf der Wirkung der Vielfachstreuung beruht, die bei der Lasermethode (Abs. 4.5.5) und in der Rechnung (Abs. 4.5.4) nicht berücksichtigt wird.

### 4.5.3 Berechnung von LEED-Strukturen

Im folgenden werden die LEED-Strukturen, die sich aus den in Abb. 4.8a und 4.9a vorgeschlagenen Atomanordnungen bei C = o.4 und C = o.5 ergeben, in der kinematischen Näherung analytisch berechnet.

In diesen Abbildungen ist jeweils eine primitive Einheitszelle gestrichelt eingezeichnet. Die Bezeichnung dieser Einheitszelle ist c(2 x 1o). Die bisher benützte Bezeichnung p(2 x 1) bezieht sich daher nur auf den Bereich innerhalb einer Domäne.

Durch die Einheitszelle c(2 x 1o) ist die mögliche Lage der Reflexe festgelegt:

$$\begin{aligned} h &= o, \pm 1, \pm 2, \ldots \; : \quad k = o, \pm 1/5, \pm 2/5, \ldots \\ h &= \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots \; : \quad k = \pm 1/1o, \pm 3/1o, \pm 5/1o \end{aligned} \tag{4.7}$$

{h,k = o, ± 1, ± 2,...} gibt die Lage der Reflexe des Grundgitters an. Die relativen Intensitäten der Überstruktur-Reflexe ergeben sich in der kinematischen Näherung aus dem Strukturfaktor der Basis des c(2 x 1o)-Gitters.

Diese Basis besteht aus vier Sauerstoffatomen im Abstand der Substrat-Gitterdimension b = o.25 nm in [oo1]-Richtung. Zur Berechnung des Strukturfaktors dieser Basis wird zunächst die Phasenverschiebung $\Delta\varphi$ zwischen zwei Kugelwellen berechnet, die bei senkrecht auftreffendem Elektronenstrahl der LEED-Kanone gleichzeitig von zwei Sauerstoffatomen mit Abstand r ausgesendet und in Richtung des Vektors $\vec{z}$ ($|\vec{z}| = 1$) beobachtet werden:

$$\Delta\varphi = \vec{r} \cdot \vec{z}/\lambda \tag{4.8}$$

Dabei ist $\lambda$ die Wellenlänge des gestreuten Elektrons. Wenn die Beobachtungsrichtung $\vec{z}$ (festgelegt durch den Auftreffpunkt des Elektronenstrahls auf der Kristalloberfläche und einem Ort auf dem LEED-Bildschirm) gegeben ist, so lassen sich daraus die Koordinaten h und k im reziproken Gitter berechnen:

$$\begin{aligned} \vec{a} \cdot \vec{z}/\lambda &= h \cdot 2\pi \\ \vec{b} \cdot \vec{z}/\lambda &= k \cdot 2\pi \end{aligned} \qquad (4.9)$$

wobei $\vec{a}$, $\vec{b}$ die Einheitszelle des Grundgitters aufspannen. Die Reflexe des Grundgitters liegen durch diese Definition bei h,k = o, $\pm$ 1, $\pm$ 2,... Die auf 1 normierte Strukturamplitude $\psi$ der gestreuten Welle für die aus vier Sauerstoffatomen bestehende Basis der c(2 x 1o)-Struktur bei C = o.4 (Abb. 4.8a) lautet mit Gl. 4.8 und 4.9:

$$\psi = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{4} e^{2\pi i (n-1)\, k} \qquad (4.1o)$$

Mit der Beziehung (34)

$$\frac{1}{N^2} \left| \sum_{n=1}^{N} e^{2\pi i (n-1) k} \right|^2 = \frac{1}{N^2} \frac{\sin^2 \pi N k}{\sin^2 \pi k} \quad ,$$

in der N die Anzahl der interferierenden Atome ist, ergibt sich aus Gl. 4.1o der Strukturfaktor der Basis :

$$|\psi|^2 = \frac{1}{16} \frac{\sin^2 \pi 4k}{\sin^2 \pi k} \qquad (4.11)$$

Die möglichen Werte für k werden durch Gl. 4.7 angegeben. Damit ergibt sich für halb- bzw. ganzzahlige Werte von h die in Abb. 4.1o durch Balken dargestellte Intensitätsverteilung im hk-Raum. Der Strukturfaktor nach Gl. 4.11 und die Lage der Reflexe einer regulären p(2 x 1)-Struktur sind

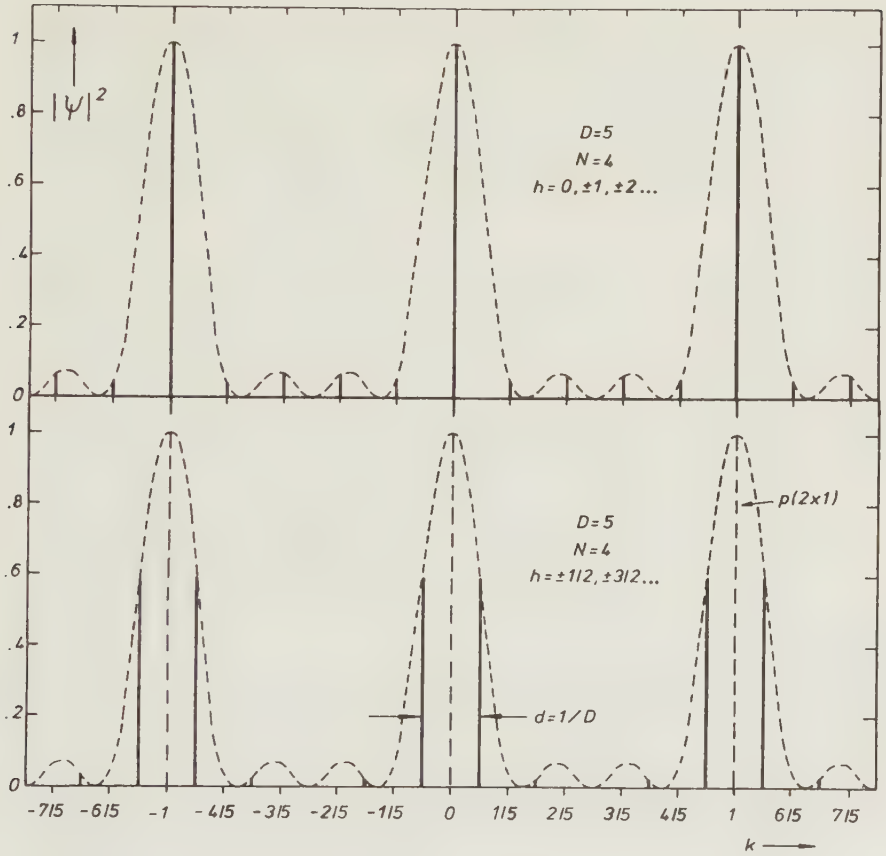



Abb. 4.10 : LEED - Intensitätsverteilung bei C = 0.4 Ml
nach Gl. 4.11

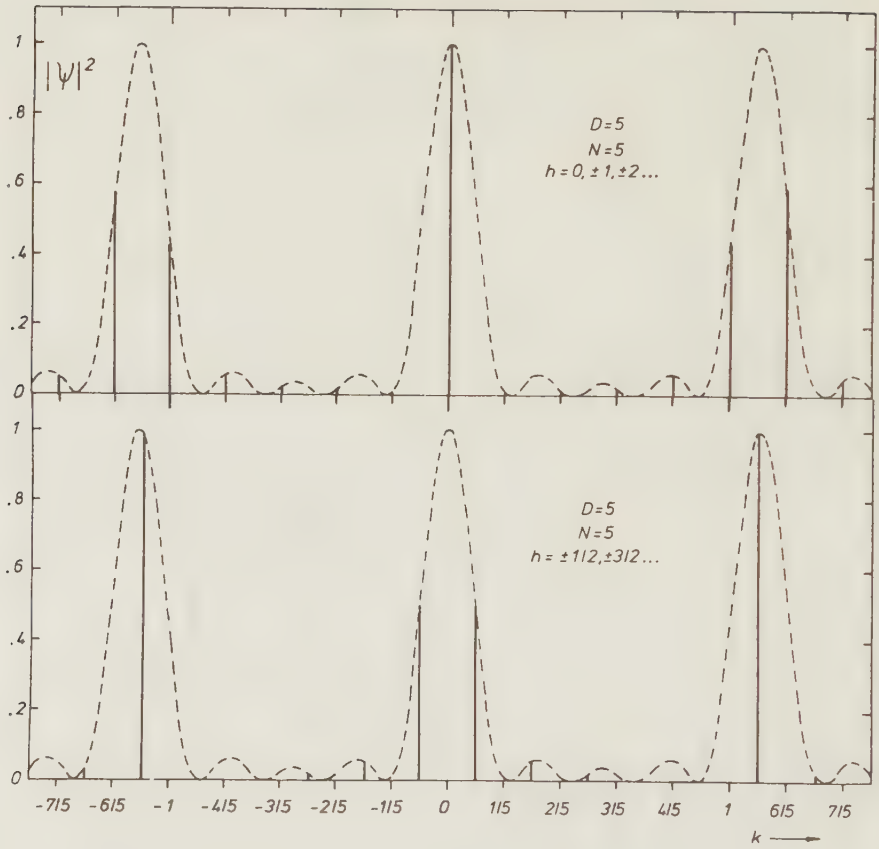



Abb. 4.11 : LEED - Intensitätsverteilung bei C = 0.5 Ml
nach Gl. 4.13

gestrichelt eingezeichnet. Die halbzahligen Reflexe der p(2 x 1)-Struktur werden durch die Domänen aufgespalten. Die ralative Aufspaltung d in k-Richtung ist nach Gl. 4.7 gleich der reziproken Domänengröße 1/D (D wird angegeben in Einheiten der Gitterdimension b in [oo1]-Richtung):

$$d = 1/D \qquad (4.12)$$

Für D = 5 ergibt sich eine Übereinstimmung der berechneten Aufspaltung mit dem Experiment.

Die anderen, durch Gl. 4.7 beschriebenen Reflexe haben relativ geringe Intensitäten. Die Satelliten h = o, $\pm$ 1,..., k = $\pm$ 5/6 um die Substratreflexe treten im Experiment bei C = o.4 stärker hervor, als nach Abb. 4.1o zu erwarten ist. Möglicherweise sind Effekte der Vielfachstreuung dafür verantwortlich, die durch die kinematische Näherung nicht beschrieben werden.

Im Bedeckungsbereich o.4<C<o.5 bleibt im Experiment die Lage der Reflexe gleich. Es verändern sich jedoch die Intensitäten der Sauerstoffreflexe bei h = $\pm$ 1/2..., k = $\pm$ 9/1o, 11/1o zugunsten des Reflexes bei k = $\pm$ 11/1o (Abb. 4.4g). Zur Erklärung dieser Intensitätsveränderung wird in dem Modell von Abb. 4.9a angenommen, daß der Abstand b' der Sauerstoffatome in [oo1]-Richtung innerhalb einer Domäne kleiner als der Abstand b des Grundgitters wird, wenn bei zunehmender Bedeckung die an den Domänengrenzen auftretenden abstoßenden Kräfte die Sauerstoff-Ketten in [oo1]-Richtung komprimieren. Für C = o.5 wurde in Abb. 4.9a b' = o.9 b angenommen. Der verkleinerte Abstand b' der Sauerstoffatome in k-Richtung drückt sich in Gl. 4.11 durch die neue Variable k' im letzten Term aus:

$$|\psi'|^2 = \frac{1}{25} \frac{\sin^2 \pi 5k'}{\sin^2 \pi k'} \qquad (4.13)$$

wobei

$$k' = \frac{b'}{b} k$$

Die möglichen Werte für k werden wieder durch Gl. 4.7 bestimmt. Die Intensität der Reflexe bei h = o, ± 1,... bzw. h = ± 1/2, ± 3/2,... ist in Abb. 4.11 durch Balken dargestellt. Der Verlauf des Strukturfaktors nach Gl. 4.13 ist gestrichelt eingezeichnet. Gegenüber Abb. 4.1o ist der Reflex h = 1/2, k = 9/1o verschwunden zugunsten des Reflexes bei k = 11/1o. Lage und Intensitätsveränderung werden somit bei diesen Reflexen richtig beschrieben. Auch bei den Satelliten um die Substratreflexe (h = o, ± 1,..., k = ± 1/5, ± 4/5, ± 6/5,..) gewinnt der äußere Reflex (k = ± 6/5) an Intensität. Dies wurde jedoch im Experiment schon bei C = o.4 beobachtet, während bei C = o.5 die Satelliten verschwinden. Eine Erklärung dieses Unterschieds ist innerhalb der kinematischen Näherung nicht sinnvoll, da Vielfachstreueffekte einen starken Einfluß auf die relativen Intensitäten haben können.

### 4.5.4 Laser-Simulation der LEED-Strukturen

Eine einfache Methode, um die Lage von LEED-Reflexen bei gegebener Anordnung der adsorbierten Atome zu bestimmen, ist die optische Simulation mit Hilfe eines Lasers (35,15). Zwei Beispiele dazu wurden in Abb. 4.8b und Abb. 4.9b gezeigt. Ausgegangen wird von den Strukturmodellen (Abb. 4.8a und 4.9a), deren Atome als schwarze Punkte mit 1.5 mm Durchmesser auf weißem Papier dargestellt werden. Das Grundgitter besteht aus einem Raster von 2o Atomen in [oo1]-Richtung (Abstand 1 cm) und 25 Atomen in [1$\bar{1}$o]-Richtung mit Abstand 1 $\sqrt{2}$ cm. Diese Bilder wurden auf Agfa-Ortho-25-Film so fotografiert, daß das Abbild auf dem Negativ 2 x 1.8 mm groß war. Wird dieses Negativ direkt vor einem HeNe-Laser angebracht, so können in ca. 3 m Entfernung auf einer Matt-

scheibe Interferenzmuster beobachtet werden, die das reziproke Gitter darstellen. Die in Abb. 4.8b und 4.9b wiedergegebenen Beugungsbilder der Laser-Simulation entsprechen den analytisch hergeleiteten Intensitätsverteilungen in Abb. 4.1o und 4.11 und wurden zur Deutung der LEED-Muster Abb. 4.4f und g des Experiments herangezogen.

## 4.6 OXIDBILDUNG IM BEREICH $1/2 < C \leq 6/5$

### 4.6.1 Bedeckungszunahme

Bei Überschreiten der Bedeckung C = 1/2 ergeben sich zwei Veränderungen: Die Haftwahrscheinlichkeit sinkt auf etwa den halben Wert (Knick bei C = 1/2 in Abb. 4.8), und im LEED-Bild tritt eine hexagonale Struktur auf (Abb. 4.4h). Dabei ist die Sauerstoffzunahme, wie im Bereich $1/3<C<1/2$, eine lineare Funktion der Aussetzung p·t. Die Aussetzung zur Erzeugung der Bedeckung 6/5 Monolagen schwankte je nach Experiment zwischen 2oo L und 13oo L. Die Streuung der Haftwahrscheinlichkeit im Bereich $1/3<C<1/2$ zwischen den einzelnen Experimenten, die in Abs. 4.5.2 auf unterschiedliche Häufigkeit von Oberflächenstufen zurückgeführt wurde, setzt sich im Bereich $1/2<C\leq6/5$ fort. Der Faktor, um den sich jedoch die Haftwahrscheinlichkeit bei Überschreiten von C = 1/2 verringert, ist von diesen Streuungen unabhängig. Als Mittelwert aus 11 Meßreihen wurde dieser Faktor zu $1.8 \pm o.3$ bestimmt. Für die Haftwahrscheinlichkeit wurde gefunden:

$$7 \cdot 1o^{-4} \leq s \leq 5 \cdot 1o^{-3}.$$

Dieses Adsorptionsverhalten läßt darauf schließen, daß auch im Bereich $1/2<C\leq6/5$ die Sauerstoffmoleküle an Oberflächenstufen adsorbiert werden. Als Ursache für den Rückgang der

Haftwahrscheinlichkeit kann angenommen werden, daß bei der vollständigen Ausbildung der p( 2 x 1) Struktur bei C = 1/2 Monolage schließlich auch etwa die Hälfte der Stufen - Adsorptionsplätze besetzt wird.

### 4.6.2 LEED-Struktur und Oberflächenmodell

Die Verringerung der Haftwahrscheinlichkeit bei C = 1/2 ist mit einem plötzlichen Auftreten einer hexagonalen LEED-Struktur verbunden (Abb. 4.4g). Anfänglich besteht gleichzeitig noch die aufgespaltene p(2 x 1)-Struktur nach Abb. 4.4f, die jedoch mit zunehmender Bedeckung (C → 1.2o) verschwindet. Dabei sind auch die Substratreflexe (Abb. 4.4a) nicht mehr sichtbar, so daß angenommen werden muß, daß nicht nur die Sauerstoffatome, sondern auch die obersten Substrat- Metallatome eine hexagonale Struktur aufweisen. Alle Reflexe der hexagonalen LEED-Struktur sind in h-Richtung (Definition in Abb. 4.4a) bei etwa gleichmäßiger Intensitätsverteilung bandartig verbreitert, wobei die Enden dieser Bänder deutlich erkennbar sind. Dadurch kann die Breite der Bänder angegeben werden. Sie beträgt 1/4 des Reflexabstandes in h-Richtung. Solange noch die aufgespaltene p(2 x 1)-Struktur neben der hexagonalen Struktur besteht, kann beobachtet werden, daß die Mitte der Bänder derjenigen Reflexe, die auf der h-Achse liegen, mit den Reflexen des Grundgitters zusammenfallen. Neben der "regulären" hexagonalen Struktur ist mit schwacher Intensität noch eine gleiche, um 3o° gedrehte Struktur mit scharfen Reflexen sichtbar.

Nach Abs. 4.9 zeigen in diesem Bereich der Sauerstoffbedeckung die niederenergetischen AES-Linien eine Bildung von NiO bzw. FeO an. Die hexagonale Beugungsstruktur kann deshalb einer ebenfalls hexagonalen Anordnung von Sauerstoff- und Metallatomen zugeschrieben werden, wie

in den (111)-Ebenen eines NiO- bzw. FeO-Kristalls (Kochsalz-Typ) . Dort wechseln sich jeweils Metall- und Sauerstoff-Atomebenen ab. In Abb. 4.12 sind die Maße der realen Grundzelle einer NiO-Struktur zusammen mit der Struktur der reinen Oberfläche dargestellt. Die Epitaxie lautet entsprechend der beobachteten LEED-Struktur:

$$\text{Oxid } (1\bar{1}1) \parallel \text{NiFe } (11o)$$

$$\text{Oxid } [121] \parallel \text{NiFe } [1\bar{1}o]$$

In der Struktur des reinen NiO (bzw. FeO) ist der Abstand der Sauerstoffatome gleich o.295 nm (o.3o7nm). Die Projektion dieses Abstandes auf die h-Richtung beträgt o.255 nm (o.266 nm). Sie weicht vom Atomabstand des Grundgitters (o.25o nm) nur um + 2 % ab (+ 6 % für FeO). Es ist deshalb anzunehmen, daß sich das Gitter des Oxids unter geringer Verkürzung dieses Abstands an das Gitter des Substrats angepaßt hat (Pseudomorphismus). Ähnliche Verhältnisse liegen in k-Richtung vor. Der Atomabstand von o.295 nm im NiO-Gitter steht zum Atomabstand des Substrats von o.354 nm genau im rationalen Verhältnis 5/6. (Das FeO-Gitter muß dazu um 4 % komprimiert werden.) Dies bedeutet, daß in [oo1]-Richtung jedes 6. Metallatom der Oxidschicht in Bezug auf das Substratgitter einen regulären Platz einnehmen kann. Ein entsprechendes Strukturmodell ist in Abb. 4.13 vorgeschlagen. Die Maße der Einheitszelle dieser Struktur gehen aus den Maßen des Substrats durch Multiplikation mit 1 ([1$\bar{1}$o]-Richtung, dichtest gepackte Richtung) bzw. mit 6 ([oo1]-Richtung) hervor. Diese Struktur wird daher als pseudohexagonale (1 x 6)-Struktur bezeichnet. Bei vollständiger Ausbildung enthält sie 6/5 Monolagen Sauerstoff (C = 1.2o). Im Experiment wird bei dieser Bedeckung ein Rückgang der Haftwahrscheinlichkeit beobachtet (Abs. 4.7). Dadurch wird diese Struktur bestätigt.

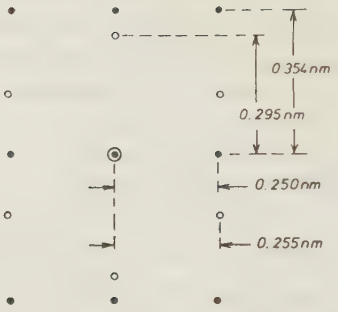



Abb. 4.12 : Maße der (111) - NiO - Struktur ( Kreise ) im Vergleich zur (110) - NiFe - Oberfläche ( Punkte )

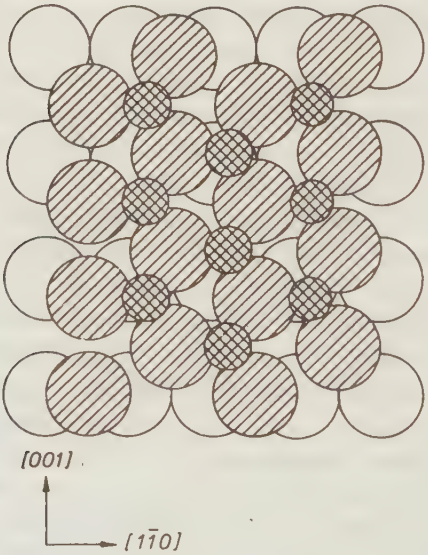



Abb. 4.13 : Pseudohexagonale Oxidstruktur, C = 1.2 Ml
Sauerstoff : gekreuzt schraffiert
1. Metallatomlage : schraffiert

Die pseudohexagonale Struktur gleicht in Bezug auf die Sauerstoff- und die erste Metallatomlage einem Modell, das von Erley und Ibach (36) für eine mit o.9 Monolagen Sauerstoff bedeckte bcc-(11o)-Fe-Oberfläche angegeben wurde. Bei dieser Bedeckung wird eine ebenfalls pseudohexagonale LEED-Struktur (36,37) mit der Einheitszellendimension (12 x 5) in Bezug auf das (11o)-Fe-Substrat gefunden (36). Auch bei der Oxidation einer (1oo)-59/41-NiFe-Oberfläche (24) tritt eine hexagonale LEED-Struktur auf (Abs. 4.1o.1). Damit zeigen diese drei Oberflächen trotz unterschiedlicher Kristallstruktur ein gleichartiges Oxidationsverhalten in diesem Bereich der Bedeckung. Diese Gleichartigkeit setzt sich auch in der nachfolgenden Phase (C > 1.2) fort.

Die Verbreiterung der Reflexe der hexagonalen Struktur in h-Richtung ist auf Domänenbänder mit statistisch schwankender Breite zurückzuführen, deren Grenzen parallel zur k-Richtung verlaufen. Da bei gleich großen, periodischen Domänen die Reflexaufspaltung von der reziproken Domänenbreite bestimmt wird (vergl. Abs. 4.5.4), kann aus der beobachteten Reflexverbreiterung (1/4 des Reflex-Abstands in h-Richtung) geschlossen werden, daß die kleinste Domänenbreite in [1$\bar{1}$o]-Richtung vier Atomabstände beträgt. Der in Abb. 4.13 dargestellte Ausschnitt aus der pseudohexagonalen Struktur stellt also gleichzeitig das schmalste Domänenband dar. In einem noch schmaleren Band wären die Sauerstoffatome nicht mehr hexagonal angeordnet. Daraus kann geschlossen werden, daß diese Anordnung zur Stabilisierung einer Domäne notwendig ist und schmalere Bänder von benachbarten Domänen umorientiert werden.

Die im LEED-Bild gleichzeitig mit der pseudohexagonalen (1 x 6)-Struktur beobachtete, um 3o$^{o}$ gedrehte hexagonale Struktur kann aus dem in Abb. 4.13 dargestellten Modell dadurch entstehen, daß die Sauerstoffatome einschließlich der ersten Metallatomschicht um 3o$^{o}$ gedreht werden. Auch in

diesem Fall ist eine rationale Anpassung an das Substrat möglich, wobei die Einheitszelle die Maße (6 x 5) in Bezug auf das Grundgitter hat. Für diese Anpassung muß eine (111)-NiO-Ebene um weniger als 2 % verzerrt werden. Die (6 x 5)-Einheitszelle ist wesentlich größer als die der (1 x 6)-Struktur. Energetisch günstige Koinzidenzen mit dem Substrat sind daher seltener. Dementsprechend wird die Struktur nur mit geringer Intensität beobachtet, die von vereinzelten Domänen dieser Orientierung herrührt. Da eine Verbreiterung dieser Reflexe nicht beobachtet wird, muß der Abstand der Domänen größer als die apparative LEED-Kohärenzlänge von ca. 1o nm sein (38,39).

## 4.7 DRUCKUNABHÄNGIGE BEDECKUNGSZUNAHME BEI C > 6/5 MONOLAGEN

Wie Abb. 4.14 zeigt, verringert sich die Haftwahrscheinlichkeit bei einer Bedeckung von 1.2 Monolagen noch einmal und bleibt anschließend annähernd konstant. Bei Beginn dieser Meßreihe wurde die Oberfläche einer Dosis von 5 L bei einem Druck von $1o^{-7}$ mbar ausgesetzt. Diese Aussetzung erzeugt nach Abs. 4.4.1 eine Bedeckung von 1/3 Monolage. Dadurch wurden die Ordinate in Abb. 4.14 geeicht. Im vorigen Abschnitt wurde bestimmt, daß die vollständige hexagonale Struktur einer Bedeckung von C = 1.2o entspricht. Der Rückgang des Haftkoeffizienten ist also mit der vollständigen Ausbildung dieser Struktur verknüpft.

Das zeitlich lineare Anwachsen der Bedeckung für $C \geq 1.2$ unterscheidet sich von allen vorherigen Phasen, bei denen die Bedeckung immer eine lineare Funktion des Produkts $p \cdot t$ war ($dC/dt \sim p$). Für C>1.2o ist das Anwachsen der Bedeckung vom Druck unabhängig. Dies ist in Abb. 4.15 gezeigt, wo die Werte für dC/dt aus zehn Meßreihen bei Drücken zwischen

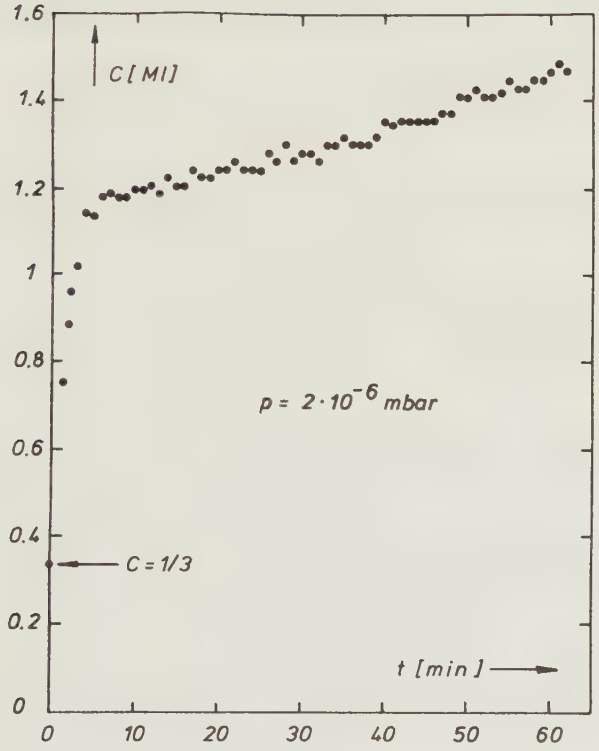



Abb. 4.14 : Sauerstoff - Bedeckungszunahme

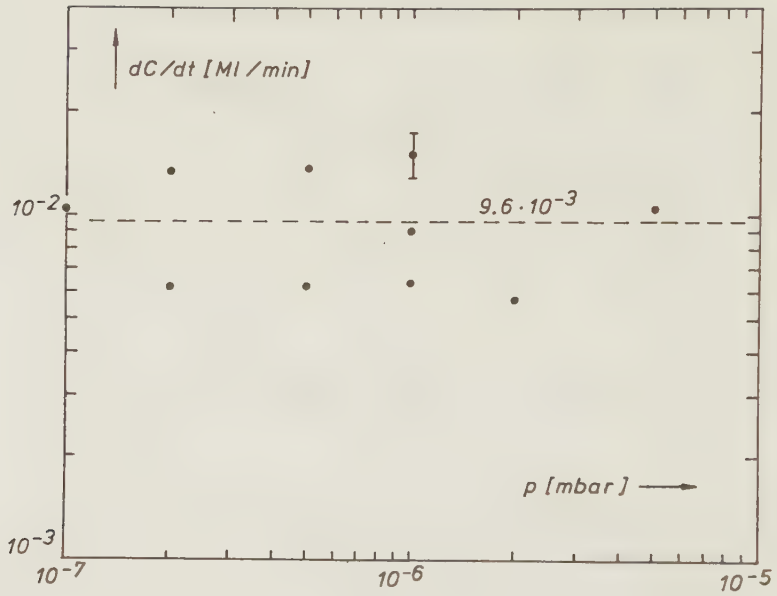



Abb. 4.15 : Druckunabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit für C > 1.2 Ml

$1 \cdot 10^{-7}$ mbar und $5 \cdot 10^{-6}$ mbar dargestellt sind. Eine mögliche Abschwächung des Auger-Signals von Sauerstoffatomen, die unter die Oberfläche eingedrungen sind, wurde dabei nicht berücksichtigt. Der Mittelwert aus diesen Meßreihen ist

$$dC/dt = 9.6 \cdot 10^{-3} \text{ [Monolagen/min]}$$
$$= 1.08 \cdot 10^{13} \text{ [Atome/(cm}^2 \cdot \text{min)]}$$

Die einzelnen Messungen weichen um bis zu einem Faktor 1.5 von diesem Wert ab.

Die Übereinstimmung im Oxidationsverhalten zwischen der (110)-60/40-NiFe-Oberfläche, der (100)-59/41-NiFe-Oberfläche und der (110)Fe-Oberfläche, die für die pseudohexagonale Struktur festgestellt worden war (Abs. 4.6 und 4.10.2), setzt sich bei Bedeckungen C > 6/5 fort: Dorfeld et al. (40) berichten von einer ebenfalls zeitlich linearen, druckunabhängigen Zunahme der Sauerstoffbedeckung der bcc-(110)-Fe-Oberfläche bei Bedeckungen größer als eine Monolage (bezogen auf (110)-Fe). Dabei wurde beobachtet, daß in diesem Bereich nach einer Unterbrechung der Sauerstoffzufuhr eine anschließende weitere Sauerstoffaussetzung zu einer kurzzeitig erhöhten Reaktionsgeschwindigkeit führte. Dies wurde damit begründet, daß während der Zeit, in der kein Sauerstoff angeboten wird, Eisenatome durch die bereits adsorbierte Schicht zur Oberfläche diffundieren und dort neue Adsorptionsplätze schaffen. Die Reaktionsgeschwindigkeit beträgt bei Dorfeld et al. in diesem Bereich $3 \cdot 10^{13}$ Atome/(cm$^2$ · min). Das Verhältnis der hier auf der (110)-60/40-NiFe-Oberfläche erhaltenen Reaktionsgeschwindigkeit von $1.08 \cdot 10^{13}$ Atome/(cm$^2$ · min) zu dem von Dorfeld et al. erhaltenen Wert ist 0.36 und entspricht damit ungefähr dem Verhältnis des Anteils an Eisenatomen (0.4) im jeweiligen Substrat. In beiden Fällen bestimmt also die Diffusion der Eisenatome durch die hexagonale Oxidschicht die Reaktionsge-

schwindigkeit. Eine Abhängigkeit vom Sauerstoffdruck wäre erst bei Drücken unter $2.5 \cdot 10^{-10}$ mbar zu erwarten. Die Nickelatome tragen offenbar nicht zur weiteren Oxidbildung bei. Dies wird bestätigt durch Ergebnisse von Wandelt (18), der u.a. die niederenergetischen Augerlinien einer polykristallinen 60/40-NiFe-Probe bei Sauerstoffansetzung untersucht hat. Dabei geht die Nickel-Konzentration in der Oberfläche ab einer Aussetzung von etwa 600 L stark zurück. Dieser Wert entspricht ungefähr der Aussetzung, für die bei der hier beschriebenen (110)-60/40-NiFe-Oberfläche die Bildung der pseudohexagonalen Struktur abgeschlossen war. Daraus kann geschlossen werden, daß überwiegend die Eisenatome an der Oxidbildung beteiligt sind.

Die bevorzugte Diffusion von Eisenatomen wurde auch bei der Bildung von etwa 10 nm dicken Oxidschichten, die auf 80/20-NiFe(Permalloy)-Filmen bei einem Sauerstoffdruck von 1 atm erzeugt wurden, von Lee und Eldrigde (19) beobachtet. Diese Oxidschicht wächst dabei während der ersten 40 Stunden bis zu einer Dicke von 30 Monolagen linear mit der Zeit an, wobei mit Hilfe von XPS-Spektren die Zusammensetzung des Oxids zu FeO angegeben wird. Die Sauerstoffzunahme kann aus den angegebenen Daten zu $1.4 \cdot 10^{13}$ Atome/($cm^2 \cdot$ min) berechnet werden. Dieser Wert liegt nahe bei der hier gefundenen Reaktionsgeschwindigkeit von $1.08 \cdot 10^{13}$ Atome/($cm^2 \cdot$ min). Die durch die Diffusion von Eisenatomen bestimmte Sauerstoffzunahme bei $C > 6/5$ stellt damit die letzte Phase der Umwandlung der reinen, metallischen Oberfläche in ein Oxid dar.

## 4.8 ÄNDERUNG DER AUSTRITTSARBEIT

Die Änderung der Austrittsarbeit $\Delta\phi$ wurde mit der Gegenspannungs-Methode (Abs. 3.4) für Sauerstoff-Aussetzungen bis zu 18o L (entsprechend einer Bedeckung C = o.6) gemessen (Abb. 4.16). Während der ersten Phase der Chemisorption, die zur p(3 x 1)-LEED-Struktur führt ($p \cdot t < 3$ L), wächst $\Delta\phi$ monoton auf + o.5 V an. Diese Erhöhung der Austrittsarbeit bedeutet, daß die adsorbierten Sauerstoffatome eine Dipolschicht mit negativer Ladung über der Oberfläche bilden. Ein Elektron, das die Oberfläche verläßt, muß unter zusätzlichem Energieaufwand das Dipolfeld überwinden.

Im Vergleich mit der Austrittsarbeitsänderung einer reinen (11o)-Ni-Oberfläche (41) wird ein wichtiger Unterschied deutlich: Bei der reinen Nickel-Oberfläche wächst $\Delta\phi$ nur bis + o.45 V bei o.6 L an. Von dieser Aussetzung an sinkt die Austrittsarbeit wieder ab und erreicht ein relatives Minimum bei 1.5 L von + o.4 V. Dieser Rückgang der Austrittsarbeit wird der p( 2 x 1)-Rekonstruktion der (11o)-Ni-Oberfläche zugeschrieben (41). Ein vergleichbares Verhalten wird bei der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche nicht gefunden. Vielmehr wächst $\Delta\phi$ nach Abb. 4.16 bei einer Erhöhung der Aussetzung bis zu 2o L linear auf + o.58 V an, um von da an konstant zu bleiben. Dieses lineare Anwachsen von $\Delta\phi$ ist verbunden mit der ebenfalls linearen Zunahme der Sauerstoffbedeckung, die sich jedoch bis 8o L fortsetzt (Abs. 4.5). Da die Zunahme der Austrittsarbeit von o.5 V (bei 3 L $\hat{=}$ 1/3 Monolage) auf o.57 V (bei 2o L $\hat{=}$ o.38 Monolagen) gerade dem Zuwachs der Sauerstoff-Bedeckung proportional ist, hat sich in dieser Phase gegenüber $C \leq 1/3$ das Dipolmoment pro adsorbiertem Sauerstoffatom nicht geändert. Dies spricht für gleiche Bindungsverhältnisse der Sauerstoffatome in beiden Phasen und gegen eine Rekonstruktion, wie sie bei der (11o)-Ni-Oberfläche gefunden wird.

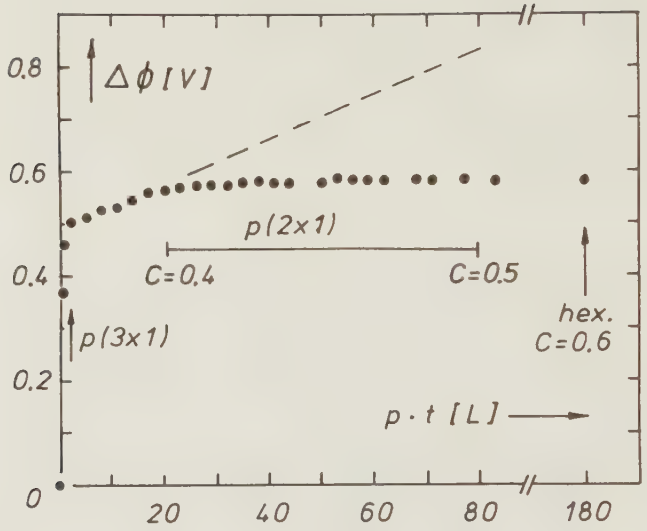



Abb. 4.16 : Änderung der Austrittsarbeit als Funktion der Sauerstoff - Aussetzung

Im Bereich der Aussetzung 2o L < p·t < 8o L bleibt die Austrittsarbeit bei der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche konstant (Abb. 4.16). Dabei nimmt die Sauerstoffbedeckung von C = o.4 auf C = o.5 zu. Bei konstantem Dipolmoment pro adsorbiertem Sauerstoffatom müßte sich die Austrittsarbeit dabei entsprechend der gestrichelten Linie in Abb. 4.16 erhöhen. Die Konstanz der Austrittsarbeit bedeutet, daß sich das Dipolmoment pro adsorbiertem Atom durch veränderte Bindungsverhältnisse verringert. Hinweise auf diese veränderten Bindungsverhältnisse werden auch bei der Analyse der in diesem Bereich auftretenden, aufgespaltenen p(2 x 1)-LEED-Struktur (Abs. 4.5.3) und bei den niederenergetischen Augerlinien (Abs. 4.5.3) gefunden: Die LEED-Struktur zeigt eine Kompression des Abstands der Sauerstoffatome in [oo1]-Richtung (Verschiebung aus der kurzen Brückenposition). Die niederenergetischen Augerlinien zeigen ab C = o.4 oxidische Eigenschaften. Der Übergang zum Oxid wird daher bei allen drei Meßverfahren beobachtet.

Die Austrittsarbeit bleibt auch noch bei C = o.6 (p·t = 18o L) konstant. Bei dieser Bedeckung tritt im LEED-Bild, neben der p(2 x 1)-Struktur, bereits die hexagonale Struktur auf (Abs. 4.6.2). Dies kann auf die Gleichartigkeit der oxidischen Bindungsverhältnisse bei der hexagonalen und bei der komprimierten p(2 x 1)-Struktur zurückgeführt werden.

## 4.9 ANWACHSEN DER OXIDISCHEN 53 eV-FeO-AUGERLINIE

In Abb. 4.17 ist das Anwachsen der 53 eV-FeO-Linie (Vergl. Abs. 4.2) als Funktion der Bedeckung C dargestellt. Die Höhe der Linie wurde aus Spektren wie Abb. 4.2c erhalten, wobei die Flanken der benachbarten Linien extrapoliert wurden. Die Unsicherheit bei dieser Extrapolation ist als Balken angegeben. Die gleichzeitig gemessene 51o eV-Sauerstofflinie dient als Maß für die Bedeckung C.

Die 53 eV-FeO-Linie tritt nach Abb. 4.17 bei Bedeckungen $C > o.4$ auf. Zwischen $C = o.4$ und $C = o.5$ werden nach Abs. 4.5.3 die Sauerstoffatome aus der kurzen Brückenposition verschoben. Dabei nähern sich die Sauerstoffatome der zweiten Atomlage an. Dadurch erhöht sich die Koordinationszahl von 2 auf 3. In kovalenten Bindungen (z.B. $H_2O$) hat Sauerstoff i.a. die Koordinationszahl 2, in ionischen Bindungen (z.B. NiO, FeO) Koordinationszahlen $\geq 3$. Vermutlich ist daher auch auf der (11o)-NiFe-Oberfläche die Erhöhung der Koordinationszahl von 2 auf 3 charakteristisch für das Auftreten der oxidischen Augerlinien. Im Bereich $o.5<C<1.2$ der hexagonalen LEED-Struktur, in der die Sauerstoffatome die Koordinationszahl 3 haben, wächst dementsprechend die 53 eV-FeO-Linie weiter an.

## 4.10 VERGLEICH MIT DER OXIDATION ANDERER OBERFLÄCHEN

### 4.1o.1 (1oo)-59/41-NiFe

Die Sauerstoffbedeckung einer (1oo)-fcc-59/41-NiFe-Oberfläche wurde von Greco et al. (24) mit AES und LEED untersucht: Nach einem anfänglich schnellen Anwachsen wird bei 2 - 4 L eine LEED-Struktur beobachtet, die mit c(2 x 2) bezeichnet wird. Dieser Struktur wird eine Bedeckung von

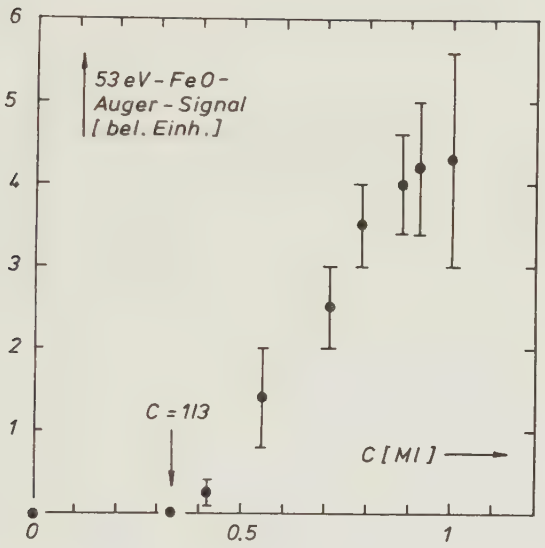



Abb. 4.17 : 53 eV - FeO - Signal als Funktion der Sauerstoff - Bedeckung

o.5 Monolagen zugeordnet. Bei verlangsamter Zunahme der Bedeckung wird ab etwa 14 L eine aufgespaltene, hexagonale LEED-Struktur mit der Epitaxie

$$\text{Oxid } (111) \parallel \text{NiFe } (1\bar{1}0)$$
$$\text{Oxid } [01\bar{1}] \parallel \text{NiFe } [001]$$

gefunden, deren Auftreten mit denselben Veränderungen der niederenergetischen Augerlinien verbunden ist, die in Abs. 4.2 für die (110)-NiFe-Oberfläche beschrieben werden. Neben der hexagonalen Struktur ist noch bei Aussetzungen von 100 L die Struktur der reinen Oberfläche zu sehen. In diesen Phasen ist die Zunahme der Bedeckung proportional zur Dosis p·t und unabhängig von der Temperatur im Bereich 373-873 K. Ab etwa 300 L wird nur noch ein sehr langsames Anwachsen der Bedeckung beobachtet. Die Autoren geben an, daß sie die hexagonale LEED-Struktur und deren Aufspaltung nicht verläßlich deuten können. Diese Schwierigkeit liegt an der Verwendung von nicht korrekten Gitterdimensionen. Bei der angegebenen Epitaxie kann jedoch gezeigt werden, daß sich eine(111)-Ebene von FeO, wie sie in Abb. 4.12 dargestellt ist, bei einer Kompression von 6 % in ihrer $[01\bar{1}]$-Richtung auch der (100)-Oberfläche anpaßt. Die Aufspaltungen der Reflexe werden durch Domänen verursacht. Es bildet sich damit dieselbe (111)-Oxidschicht aus, die auch auf der (110)-NiFe-Oberfläche und den (110)- und (100)-Oberflächen von bcc-Fe gefunden wird (Abs. 4.6.2). Der starke Rückgang des Haftkoeffizienten bei etwa 300 L wird dadurch verständlich, daß die Ausbildung der hexagonalen (111)-FeO-Lage abgeschlossen ist. Dabei verschwinden auch die Substratreflexe, die zunächst noch neben der hexagonalen Struktur sichtbar waren. In diesem Verhalten gleichen sich die (100)- und die (110)-Oberfläche (Abs. 4.6.1) völlig.

Damit ist für die (1oo)-Oberfläche eine Bedeckungseichung möglich, die jedoch von derjenigen der Autoren abweicht. Insbesondere ergibt sich für die "c(2 x 2)"-Struktur statt o.5 Monolagen der Wert o.25 ± o.3 Monolagen. Möglicherweise handelt es sich daher bei dieser Struktur um eine p(2 x 2)-Struktur, wie sie auch auf der fcc-(1oo)-Oberfläche von reinem Nickel gefunden wird. Mit dieser Eichung ergibt sich eine weitere Gemeinsamkeit zwischen der (1oo)- und der (11o)-NiFe-Oberfläche: Die Flächendichte der Sauerstoffatome, bei der Oxidbildung eintritt, ist $4 \cdot 1o^{13}$ Atome/$cm^2$ bei (1oo) NiFe (o.25 Ml) bzw. $4.5 \cdot 1o^{13}$ Atome/$cm^2$ bei (11o)-NiFe (o.4 Ml, Abs. 4.9), und damit bei beiden Oberflächen etwa gleich. Nach der vollständigen Ausbildung der (111)-FeO-Lage verläuft die Sauerstoffzunahme in der letzten Phase bei der (1oo)-NiFe-Oberfläche mit $o.7 \cdot 1o^{13}$ Atome/($cm^2 \cdot$ min) im Rahmen der Streuung dieser Werte vergleichbar schnell wie bei der (11o)-NiFe-Oberfläche mit $1.o8 \cdot 1o^{13}$ Atome/($cm^2 \cdot$ min) (Abs. 4.7). Eine Angabe, ob die Zunahme wie in den vorangehenden Phasen druckabhängig ist, wird nicht gemacht. Daher kann angenommen werden, daß auch in dieser Phase die Oxidation nach demselben, druckunabhängigen Mechanismus abläuft, wie bei der (11o)-NiFe-Oberfläche.

Zusammenfassend unterscheidet sich die Oxidation der (1oo)- und (11o)-6o/4o-NiFe-Oberflächen nur in der Anfangsphase, wo die laterale Ordnung der Sauerstoffatome durch die Substratgeometrie bestimmt wird. Der sich anschließende oxidische Zustand ist bei beiden Oberflächen gleich. Dieser Zustand wird auch auf der (11o)-Fe-Oberfläche gefunden.

### 4.1o.2 fcc(11o) Ni und bcc(11o) Fe

Das Oxidationsverhalten der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche wird in diesem Abschnitt mit den (11o)-Oberflächen der Legierungsbestandteile Ni und Fe verglichen. Gegenüber der (11o)- Ni-Oberfläche treten auffällige Unterschiede auf, obwohl beide Kristallstrukturen kubisch flächenzentriert sind und sich die Gitterkonstanten (Ni: o.352 nm, 6o/4o-NiFe: o.354 nm) um weniger als 1 % unterscheiden. Auf der (11o)-Ni-Oberfläche werden Sauerstoffatome bei Bedeckungen um 0.1 Monolagen wie bei der 6o/4o-NiFe-Oberfläche in der kurzen Brückenposition adsorbiert (41,42). Bereits bei o.3 Monolagen Sauerstoff liegt bei der (11o)-Ni-Oberfläche jedoch eine Rekonstruktion (Umordnung der Metallatome der ersten Atomlage) vor, wobei im LEED-Bild eine p(2 x 1)-Struktur auftritt (41-44). Bei dieser Rekonstruktion sind die Sauerstoffatome in einer langen Brückenposition in einer Höhe von o.o25 nm gebunden (43).

Im Gegensatz dazu kann auf der 6o/4o-NiFe-Oberfläche die Sauerstoffbedeckung bis auf o.5 Monolagen erhöht werden, ohne daß eine Rekonstruktion eintritt. Die Sauerstoffatome werden bis zur Bedeckung C = o.4 in der kurzen Brückenposition adsorbiert (Abs. 7).

Auf der (11o)-Ni-Oberfläche werden bei einer Erhöhung der Sauerstoffbedeckung bis auf zwei Monolagen ungeordnete NiO-Kristallite gebildet, die keine LEED-Struktur zeigen. Dagegen bildet die 6o/4o-NiFe-Oberfläche bei 1.2 Monolagen eine geordnete, oxidische, pseudohexagonale Struktur aus (Abs. 4.6.2). Die kristallographische Ähnlichkeit zwischen beiden Oberflächen führt also nur bei kleinen Bedeckungen ($C \approx o.1$) zu gleichem Verhalten gegenüber Sauerstoff (Adsorption in der kurzen Brückenposition). Bei höheren Bedeckungen ergeben sich Unterschiede in der Reaktionskinetik und in den Ordnungszuständen.

Die Reaktion der (11o)-Fe-Oberfläche mit Sauerstoff führt bei Bedeckungen unter o.4 Monolagen wegen der kubisch raumzentrierten Kristallstruktur des Eisens zu anderen Ordnungszuständen der Sauerstoffatome als die (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche. Nach HREELS-Messungen von Erley und Ibach (36) werden die Sauerstoffatome in diesem Bedeckungsbereich auf der (11o)-Fe-Oberfläche in einer dort als lange Brücke bezeichneten Position gebunden (Abb. 4.18). Die Umgebung des Sauerstoffatoms besitzt dabei dieselbe Symmetrie wie in der kurzen Brückenposition der 6o/4o-NiFe- bzw. Ni-Oberfläche. Der Abstand der bindenden Fe-Atome ist o.286 nm und damit um 14.4 % größer als der Abstand der bindenden Atome der 6o/4o-NiFe-Oberfläche von o.25 nm. Die Eisenatome, die die rechteckige Grundzelle zentrieren, können ebenfalls an langen Brückenbindungen der Sauerstoffatome teilnehmen. Dadurch ergeben sich für $C < o.4$ andere LEED-Strukturen (37) als bei der 6o/4o-NiFe.Oberfläche. Eine Rekonstruktion tritt bei der (11o)-Fe-Oberfläche nicht ein. Bei einer Bedeckung über $C = o.4$ (bezogen auf (11o) Fe) verschwinden die LEED-Überstrukturen (36,37). Nach Temperaturerhöhung wird eine hexagonale Struktur beobachtet. In dieser Struktur wird von Erley und Ibach (36) ein Modell vorgeschlagen, das in Bezug auf die Sauerstoff- und die erste Metallatomlage gleich ist mit dem in Abb. 4.13 dargestellten Modell für die pseudohexagonale Struktur auf der 6o/4o-NiFe-Oberfläche. Die Ausbildung einer geschlossenen Oxidschicht dieser Struktur tritt also sowohl bei bcc(11o)-Fe als auch bei fcc-(11o)- und (1oo)-6o/4o-NiFe trotz der unterschiedlichen, zugrunde liegenden Kristallstrukturen auf. Im Anschluß daran verläuft die Oxidation bei allen drei Oberflächen nach demselben, druckunabhängigen Mechanismus, bei dem die Diffusion der Eisenatome durch die pseudohexagonale, oxidische Struktur die Reaktionsgeschwindigkeit bestimmt (Abs. 4.7).

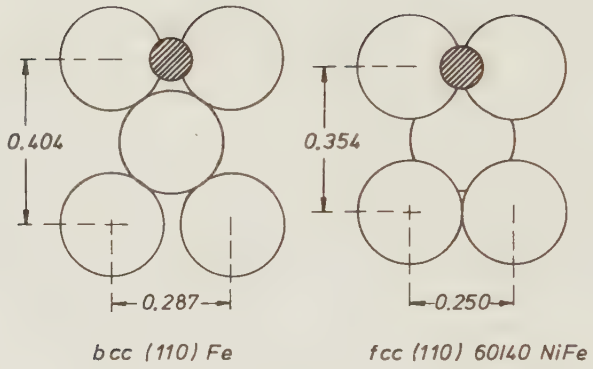



Abb. 4.18 : Vergleich der Adsorptionsplätze von Sauerstoff ( schraffiert )

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß die Reaktion der fcc (11o)-6o/4o/NiFe-Oberfläche mit Sauerstoff derjenigen der bcc (11o)-Fe-Oberfläche gleicht, was die Position der Sauerstoffatome bei Bedeckungen C < o.4 und die oxidischen Phasen bei C > o.4 betrifft. Die unterschiedliche Kristallstruktur wirkt sich nur auf die lateralen Odnungszustände (LEED-Strukturen) bei C < o.4 aus.

4.1o.3 Andere fcc (11o)-Oberflächen

Wie die (11o)-Ni-Oberfläche zeigt auch die (11o)-Cu-Oberfläche bei Sauerstoff-Bedeckung zunächst eine p(2 x 1)-LEED-Struktur. Diese Struktur wird auch bei Legierungen verschiedener Zusammensetzungen zwischen Ni und Cu beobachtet (45).

Auf (11o) Rh- (46) und (11o) Pd-Oberflächen (47) wird bei Sauerstoffaussetzung zunächst eine p(3 x 1)-, dann eine p(1 x 2)-Struktur beobachtet, denen jeweils eine Bedeckung von 1/3 bzw. 1/2 Monolage zugeordnet wird. Diese Strukturen unterscheiden sich von denen der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche dadurch, daß die Dimensionen der Einheitszellen vertauscht sind. Eine Rekonstruktion wird nicht in Betracht gezogen. Angaben über mögliche Adsorptionsplätze der Sauerstoffatome werden nicht gemacht.

Bei der Adsorption von Sauerstoff auf (11o) Ag wird bei sehr kleinen Anfangshaftwahrscheinlichkeiteneine Folge von LEED-Strukturen beobachtet, die von p(7 x 1) bis p(2 x 1) führt (48). Diese geordnete Abfolge und die gute Korrelation mit entsprechenden Bedeckungen ((p(2 x 1)$\hat{=}$ C = 1/2) werden als Argument gegen eine Rekonstruktion angeführt. HREELS-Messungen sprechen in diesem Bereich für einen einzigen Adsorptionsplatz (49). Durch Streuung von Helium-

Ionen niedriger Energie (5o) wurde für diesen Platz die lange Brückenposition gefunden, wobei die Sauerstoffatome in der Ebene der obersten Silberatome liegen.

Die reinen (11o)-Oberflächen von Ir, Pt und Au sind zu einer (1 x 2)-Struktur rekonstruiert (51). Eine unrekonstruierte (11o)-Pt-Oberfläche wurde in einem metastabilen Zustand erhalten (52). Bei (11o)Ir (53-55) und (11o) Pt (56) wird die Rekonstruktion durch adsorbierten Sauerstoff aufgehoben. Die LEED-Analyse einer c (2 x 2)-Struktur auf (11o)-Ir, die einer Bedeckung von 1/2 Monolage zugeordnet wird, ergibt, daß die Sauerstoffatome in der kurzen Brückenposition gebunden sind (55).

In allen Fällen, in denen eine Aussage über die Position von chemisorbiertem Sauerstoff bei kleinen Bedeckungen ($C < o.5$) gemacht wird, ergibt sich also eine Brückenposition mit der Koordinationszahl 2. Dies stimmt mit dem Ergebnis der Positionsbestimmung (kurze Brücke) bei der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche überein. Die zentrierende Position, wie sie z.B. bei Sauerstoff auf (1oo)Ni gefunden wird, tritt bei den fcc (11o)-Oberflächen nicht auf (57). Oberflächen, auf denen Sauerstoff in einer Scheitelposition absorbiert ist, sind nicht bekannt.

# 5. GRUNDLAGEN DER COMPUTER-SIMULATIONEN

Die Ionenstreu-Experimente wurden mit einem Computer-Programm simuliert, das im Hinblick auf vielfältige Verwendbarkeit ausgelegt wurde. Bei der Entwicklung des Programms wurde von bereits vorhandenen Programmen von C. Varelas (beschrieben in (58)) und H.D. Carstanjen (59) ausgegangen. Im folgenden Kapitel werden die physikalischen Grundlagen der Simulationen behandelt. Das Programm und seine Bedienung wird in Abs. 9 beschrieben.

## 5.1 BAHN EINES PROJEKTILS

Die Projektile starten in einer Höhe von o.6 nm über der Oberfläche von einem Eingabe-Rasterfeld aus mit den Anfangswinkeln $\phi$ senkrecht zur Oberfläche und $\Theta$ zu einer wählbaren, niedrig indizierten Richtung in der Oberfläche. Die Anfangskoordinaten in diesem Rasterfeld sind so verteilt, daß bei einer ungestuften Oberfläche eine Einheitszelle gleichmäßig von allen Projektilen bestrahlt wird. Orts- und Richtungsänderungen des Projektils werden durch binäre Stöße mit den thermisch ausgelenkten Atomen des Targets (Metallatome, Adsorbatatome) beschrieben. Jedes Targetatom befindet sich innerhalb einer Streuzelle, in der die Potentiale der benachbarten Atome vernachlässigt werden. Bei jedem Stoß werden folgende Daten neu berechnet:

- die absoluten Ortskoordinaten X und Y, wobei X = O die Lage der niedrig indizierten Atomkette (Z-Achse) in der Oberfläche und Y = O die Oberfläche bezeichnet; im Inneren des Kristalls ist Y < O;

- die Streuzellen-Koordinaten XC und YC;
- die Komponenten des Relativimpulses PXR und PYR in X- und Y-Richtung, die identisch sind mit den Winkeln zur niedrig indizierten Gitterrichtung;
- der Energieverlust DE für diesen Stoß und die Energie E des Projektils nach dem Stoß;
- der Beitrag zur Emission von Sekundärelektronen EOUTC.

Nach jedem Stoß werden aus den Streuzellen-Koordinaten unter Berücksichtigung des Kristallaufbaus und der Streuzellengrenzen die Streuzellenkoordinaten für den nächsten Stoß berechnet (Abs. 5.2). Atomare Stufen an der Oberfläche, sowohl aufwärts als auch abwärts, können ebenfalls durch Koordinatentransformationen dargestellt werden. Ein konstanter Abstand der Stufen kann vorgegeben werden. Statt der Variation der Starthöhe eines Projektils im Eingangs-Rasterfeld wird bei einer gestuften Oberfläche die Lage der Stufen auf der Z-Achse variiert. Die dadurch ungleichmäßige Bestrahlung der Einheitszellen in der Oberfläche ist bei kleinen Einschußwinkeln $\phi$ (axiale Gitterführung und Spiegelreflexion an der Oberfäche) vernachlässigbar.

Wenn die Impulsrichtung zur niedrig indizierten Atomkette nach einem Stoß bestimmte Grenzwerte überschreitet, so wird die Berechnung der Bahn durch Einzelstöße abgebrochen. Diese Grenzwerte werden festgelegt durch den Definitionsbereich der Transformationen, durch die die Streuzellen-Koordinaten des nächsten Stoßes berechnet werden. Sie liegen je nach Einschußrichtung zwischen $20^{\circ}$ und $50^{\circ}$. Falls die Y-Komponente des Impulses dabei nicht im Bereich $0^{\circ} \leq PYR \leq 60^{\circ}$ und die X-Komponente nicht im Bereich $|PXR| \leq 45^{\circ}$ liegt, wird das Projektil als nicht nachgewiesen gewertet, da die Wahrscheinlichkeit gering ist, daß es durch einen weiteren Großwinkelstoß gerade wieder in den Nachweisbereich (PYR $\leq$ PYRDET) gelangt. Falls die Impulskomponenten aber in diesem

Bereich liegen, so wird zunächst berechnet, ob das Projektil bei einer geradlinig fortgesetzten Bahn nach Abzug eines entsprechenden Energieverlusts die Oberfläche noch erreichen kann. Ist dies nicht der Fall, so bleibt das Projektil im Volumen stecken. Ansonsten wird es zu den Projektilen gezählt, die die Oberfläche wieder verlassen.

## 5.2 BINÄRER STOSS

In der Näherung des binären Stoßes wird innerhalb einer festliegenden Streuzelle nur das Potential eines einzelnen Targetatoms berücksichtigt. Die Potentiale aller anderen Atome werden vernachlässigt. Diese Näherung ist gut bei kleinen Stoßparametern. Bei großen Stoßparametern, also im Bereich des Rands einer Streuzelle, ist der Einfluß der Nachbaratome auf das Streupotential nicht mehr vernachlässigbar. Dafür werden hier die Streuwinkel sehr klein, so daß die Bahn des Projektils durch die Einteilung in Streuzellen nicht wesentlich beeinflußt wird.

Im folgenden wird die Bewegung des Projektils von einem streuenden Atom zum nächsten beschrieben (Abb. 5.1). Die geometrischen Beziehungen werden von H.-D.Carstanjen (59) übernommen. Das Projektil trifft in der Querebene Z=0 am Orts $\vec{s}_o$ mit dem Impuls $p_o$ auf und wird in der Ebene, die durch $\vec{p}_o$ und $\vec{s}_o$ aufgespannt wird, um den kleinen Winkel $\vartheta$ abgelenkt. Sein Impuls ändert sich dabei zu

$$\vec{p}_1 = \vec{p}_o + \Delta p$$
$$= \vec{p}_o + \vartheta \cdot |\vec{p}_o| \cdot \frac{\vec{s}_o}{|\vec{s}_o|} \qquad (5.1)$$

Dabei ist angenommen, daß $\vartheta << 1$ und $\alpha << 1$, wobei $\alpha$ der Winkel zwischen $\vec{p}_o$ und der Z-Achse ist. Die Berechnung einer

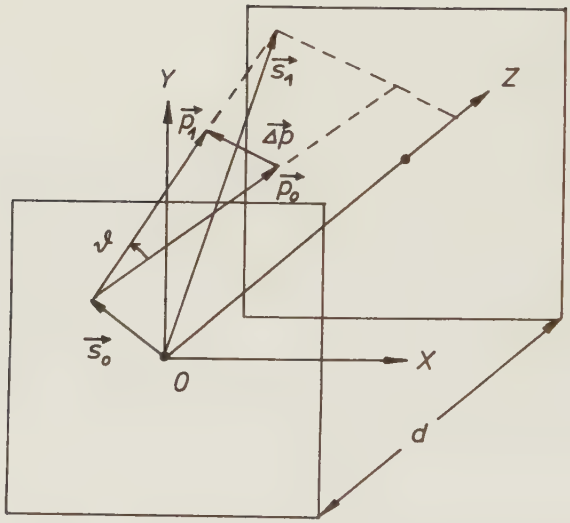



Abb. 5.1: Streuung des Projektils an einem Targetatom bei O

Bahn wird auch dann fortgesetzt, wenn diese Bedingungen nicht mehr erfüllt sind. Da ein solches Teilchen i.a. nicht mehr den Gitterführungsbedingungen unterliegt (random-Teilchen), ist die Ungenauigkeit seiner Bahn ohne Einfluß auf die Streuausbeute .

Unter der Annahme einer geradlinigen Bewegung zur nächsten Streuzelle im Abstand d trifft das Projektil dort am Ort $\vec{s}_1$ auf:

$$\vec{s}_1 = \vec{s}_o + \frac{d}{(p_1)_z} \vec{p}_1 \qquad (5.2)$$

Für $\alpha << 1$ gilt:

$$(p_1)_z \approx |\vec{p}_1|$$

Damit wird Gl. 5.2 zu

$$\vec{s}_1 = \vec{s}_o + d \frac{\vec{p}_1}{|\vec{p}_1|} \qquad (5.3)$$

Durch die Einführung von Relativimpulsen

$$\vec{p}_{o\,rel} = \frac{\vec{p}_o}{|\vec{p}_o|}$$

$$\vec{p}_{1\,rel} = \frac{\vec{p}_1}{|\vec{p}_1|} \qquad (5.4)$$

vereinfacht sich Gl. 5.1, in Komponenten geschrieben, zu:

$$p^1_{x\,rel} = p^o_{x\,rel} + \frac{x_o}{s} \cdot \vartheta$$

$$p^1_{y\,rel} = p^o_{y\,rel} + \frac{y_o}{s} \cdot \vartheta \qquad (5.5)$$

Darin ist s der Abstand zum streuenden Atom, der in der Näherung einer geradlinigen Bewegung gleich dem Stoßparameter ist:

$$s = |\vec{s}_o| = \sqrt{x_o^2 + y_o^2}$$

Aus Gl. 5.5 läßt sich der Impuls nach dem Stoß berechnen. Mit Gl. 5.4 ergibt sich aus Gl. 5.2:

$$x_1 = x_o + p^1_{x\,rel} \cdot d$$

$$y_1 = y_o + p^1_{y\,rel} \cdot d \qquad (5.6)$$

Mit Gl. 5.5 erhält man damit den Ort des nächsten Stoßes.

Bei Berücksichtigung von thermischen Auslenkungen $x_{th}$, $y_{th}$ des Targetatoms (die Auslenkung in Z-Richtung wird vernachlässigt) ändert sich Gl. 5.5 zu

$$p^1_{x\,rel} = p^o_{x\,rel} + \vartheta(x_o - x_{th})/s \qquad (5.7)$$

$$p^1_{y\,rel} = p^o_{y\,rel} + \vartheta(y_o - y_{th})/s$$

mit $s = \sqrt{(x_o - x_{th})^2 + (y_o - y_{th})^2}$

Gl. 5.6 gilt unverändert.

## 5.3 ABLENKWINKEL

Nach Lehmann und Leibfried (60) kann der Ablenkwinkel $\vartheta$ eines Projektils (Masse $M_1$, Kernladungszahl $Z_1$, Energie im Laborsystem $E_1$) bei der Streuung an einem Targetatom (Masse $M_2$, Kernladungszahl $Z_2$) im Schwerpunktsystem durch eine Reihenentwicklung dargestellt werden:

$$\vartheta = \sum_{\nu=1}^{\infty} \vartheta_\nu \qquad (5.8)$$

Darin ist:

$$\vartheta_\nu = \frac{-2b}{2^\nu \cdot \nu!\, E_r^\nu} \int_b^\infty \frac{dr}{(r^2-b^2)} \left\{\frac{d}{dr}\,\frac{1}{r}\right\}^\nu \cdot V_{(r)}^\nu \; r^{2\nu-1} \qquad (5.9)$$

V(r) ist das Wechselwirkungspotential, b der Stoßparameter und

$$E_r = E_1 \frac{M_2}{M_1+M_2} \qquad (5.1o)$$

die relative Energie zwischen Projektil und Targetatom bei großen Abständen. Der erste Summand $\vartheta_1$ in Gl. 5.8 wird als Impulsnäherung bezeichnet, da er direkt aus der Beziehung

$$\vartheta_1 = \Delta p / p$$

hergeleitet werden kann. Varelas und Sizmann (61) haben die Ablenkwinkel berechnet, bis zu denen die Impulsnäherung bei vorgegebener maximaler Abweichung von Gl. 5.8 anwendbar ist. In Tab. 5.1 werden diese Ablenkwinkel für die Stoßpartner Helium-Nickel und Helium-Sauerstoff bei verschiedenen Energien des He-Projektils angegeben:

Tabe. 5.1

| | für Abweichungen ≤ | | Energie [keV] 2oo | 2o |
|---|---|---|---|---|
| He→Ni | 1o % | $\vartheta \lesssim$ | 6o° | 2o° |
| | 1 % | | 2° | o.7° |
| He→O | 1o % | | 62° | 4o° |
| | 1 % | | 15° | 1.3° |

Für unter $\phi = 1^\circ$ einfallende 2oo keV-He-Projektile bleibt die Winkeländerung pro Stoß bei Reflexion an einer Ni-[1$\bar{1}$o]-Kette kleiner als o.1°, bei Reflexion an einer Sauerstoff Kette mit Atomabstand 1.o62 nm (1/3 ML bei [oo1]-Einschußrichtung), kleiner als 1°. Die Impulsnäherung ist also ge-

eignet zur Beschreibung der Bahnen von Projektilen, die vom Gitter geführt werden. Größere Ablenkwinkel können auftreten beim Stoß mit dem vordersten Atom einer Stufe, bei Stößen mit einer Kette oder Ebene mit einem größeren als dem jeweiligen kritischen Winkel und bei Stößen mit thermisch stark ausgelenkten Atomen. Solche Großwinkelstöße werden von der Impulsänderung noch mit einer Genauigkeit $\lesssim$ 1o % wiedergegeben. Eine genauere Kenntnis dieser Bahnen ist jedoch nicht erforderlich, da diese Teilchen i.a. nicht mehr einer planaren oder axialen Gitterführung unterliegen.

Als Potential in Gl. 5.9 wurde das nach dem statistischen Atommodell ermittelte Thomas-Fermi-Potential in der Moliere-Näherung verwendet:

$$V_{(r)} = \frac{Z_1 \cdot Z_2 \cdot e^2}{r} \cdot \phi_{(r/a_{TF})} \qquad (5.11)$$

Darin ist

$$\phi_{(r/a_{TF})} = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \exp(-\beta_i \, r/a_{TF}) \qquad (5.12)$$

mit

$$\alpha_i = \{o.1o;\ o.55;\ o.35\}$$

$$\beta_i = \{6.o;\ 1.2;\ o.3\} \qquad (5.13$$

Der Thomas-Fermi-Abschirmradius $a_{TF}$ ist nach (62):

$$a_{TF} = o.8853\ a_o \cdot (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}\ , \qquad (5.14)$$

wobei

$$a_o = \frac{\hbar^2}{m_e \cdot e^2} = o.o529\ \text{nm}\ \text{(Bohr'scher Radius)}\ .$$

Für He und Ni ist $a_{TF}$ = o.o142 nm, für He und O ist $a_{TF}$ = o.o198 nm. Das Potential nach Gl. 5.11 für He und Ni ist in Abb. 5.2 dargestellt.

Das Ergebnis, das nach Einsetzen von Gl. 5.11 in Gl. 5.9 erhalten wird, kann nach Varelas und Sizmann (61) durch folgenden Ausdruck angenähert werden, der sich durch kurze Computer-Rechenzeit auszeichnet:

$$\vartheta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_{TF} \cdot E_r} \begin{cases} \frac{1.o1}{\rho} \exp(-o.5\,\rho) & \text{für } 1o^{-3} \leq \rho \leq 1,5 \\ (o.o3|\rho-3.8| + o.64) \cdot \frac{1}{\rho} \cdot \exp(-o.3\rho) & \text{für } 1.5 = \rho = 3o \end{cases} \tag{5.15}$$

Darin ist

$$\rho = s/a_{TF} \quad ,$$

wobei, wie im weiteren, $s = \sqrt{x_o^2 + y_o^2}$ für den Stoßparameter b gesetzt wurde. Die Grenze $1o^{-3}$ für $\rho$ in Gl. 5.15 ist gültig für diese letzte Näherung. Nach Varelas und Sizmann (61) ist die dieser Gleichung zugrunde liegende Impulsnäherung jedoch nur für Werte von $\rho$ gültig, für die der Ablenkwinkel $\vartheta$ die in Tab. 5.1 angegebenen Werte nicht überschreitet. Durch diese Werte kann sich eine größere untere Grenze $\rho_u$ ergeben.

Für den Ablenkwinkel $\vartheta_L$ im Laborsystem gilt bei kleinen Winkeln $\vartheta$ ($\sin\vartheta \approx \vartheta, \cos\vartheta \approx 1$):

$$\vartheta_L = \vartheta \frac{M_2}{M_1 + M_2}$$

Mit Gl. 5.15 ergibt sich damit:

$$\vartheta_L = FE \cdot \frac{1}{E} \begin{cases} \frac{1.o1}{\rho} \cdot \exp(-o.5\,\rho) & \text{für } \rho_u < \rho \leq 1.5 \\ (o.o3 \cdot |\rho-3.8| + o.64) \cdot \frac{1}{\rho} \cdot \exp(-o.3\rho) & \text{für } 1.5 \leq \rho \leq 3o \end{cases} \tag{5.16}$$

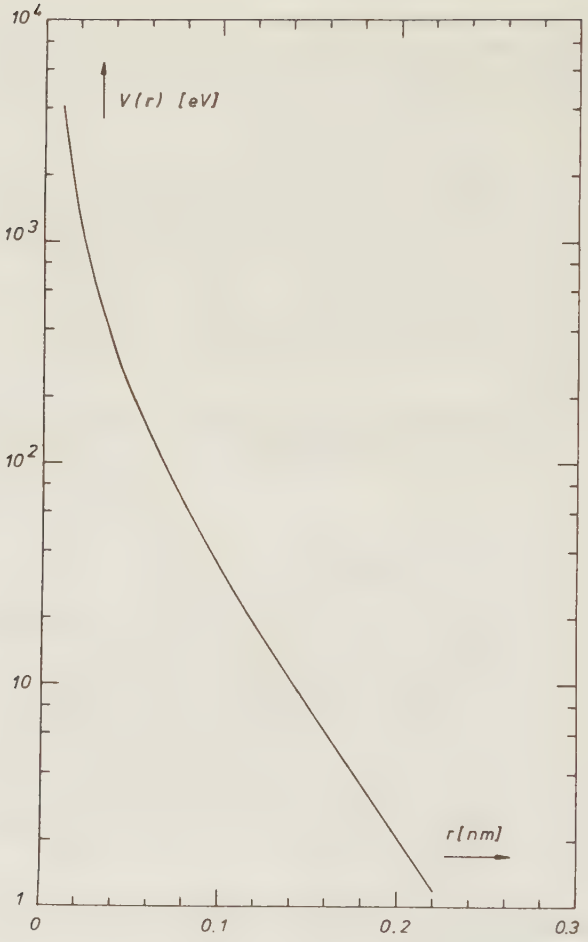



Abb. 5.2 : Streupotential für He an Ni

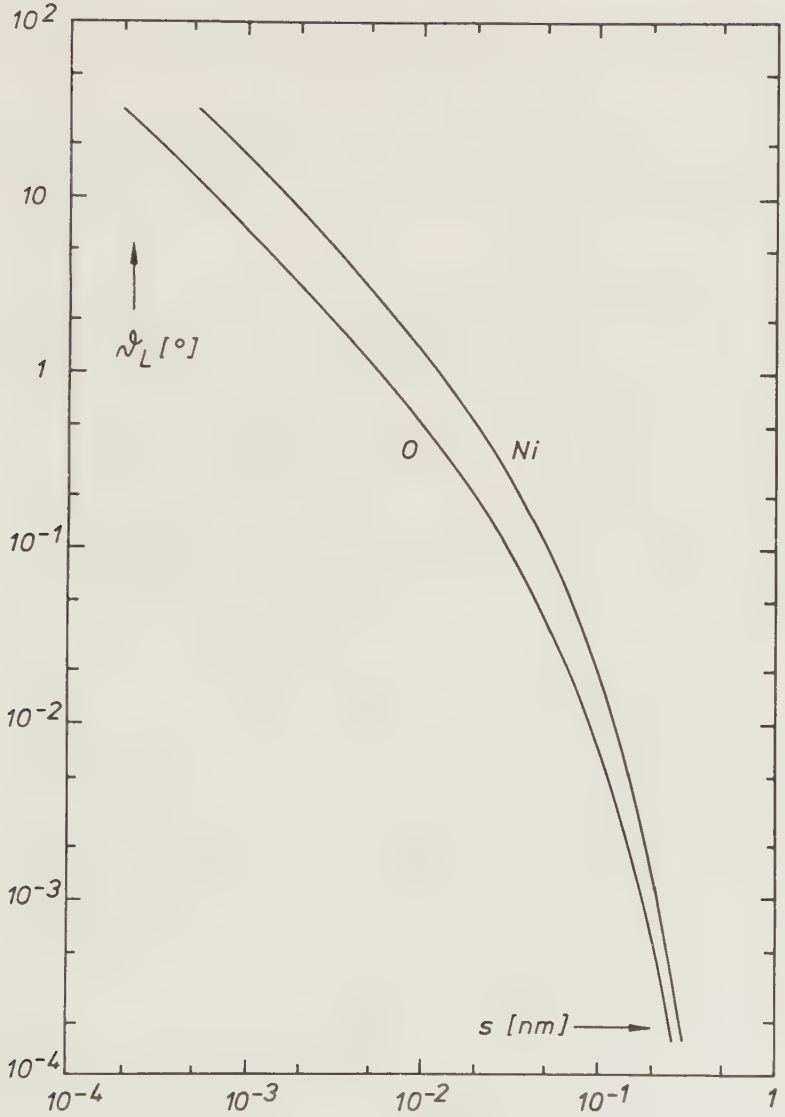



Abb. 5.3 : Ablenkwinkel für ein 200 keV - He - Projektil bei Streuung an einem Ni - bezw. O - Atom

Darin ist

$$FE = Z_1 \, Z_2 \, e^2/a_{TF}$$

$\sqrt{\delta_L}$ ist in Abb. 5.3 für 2oo keV-He-Projektile als Funktion des Stoßparameters s für Streuung an einem einzelnen Nickel- bzw. Sauerstoffatom dargestellt.

## 5.4 GITTERSCHWINGUNGEN

### 5.4.1 Gitterschwingungen im Inneren des Kristalls

Das Streuverhalten des Kristalls wird durch die Gitterschwingungen beeinflußt. Diese werden deshalb im Computer-Programm berücksichtigt. In den beiden ersten Atomlagen weichen die Amplituden dieser Gitterschwingungen vom Inneren des Kristalls ab (Abs. 5.4.2). Ab der 3. Atomlage werden die Schwingungen in einer Vereinfachung als Gauß-verteilt, isotrop und unabhängig von der Tiefe angenommen. Für die mittlere Amplitude gilt nach dem Debye-Modell (63):

$$\sqrt{\overline{u^2}} = \frac{3\,\hbar}{\sqrt{M_2 k_B T_D}} \left[\frac{T}{T_D} \cdot g(T_D/T) + \frac{1}{4}\right]^{1/2}$$

Darin sind:

$M_2$ : Masse des Targetatoms (Ni: $9.8 \cdot 1o^{-23}$ g)

$\hbar$ : $1.o54 \cdot 1o^{-27}$ $\frac{g \cdot cm^2}{s}$

$k_B$ : $1.38 \cdot 1o^{-14}$ $\frac{g \cdot cm^2}{s \cdot K}$

$T$ : absolute Temperatur in K

$T_D$ : Debye - Temperatur; für Ni:
$T_D = 4oo\ K \pm 1o\ K$ (64,65)

$$g(T_D/T) = \frac{T}{T_D} \int_o^{T_D/T} \frac{dx}{e^x - 1} \quad ; \quad \text{Debye-Funktion,}$$

Darstellung z.B. in (66).

Für $T >> T_D$ ($x \approx o$) läßt sich $g(T_D/T)$ entwickeln:

$$g(T_D/T) = \frac{T}{T_D} \cdot \int_o^{T_D/T} (1-1/2\ x \pm \ldots)\ dx$$

$$\approx 1 - \frac{1}{4}\ \frac{T_D}{T}$$

Mit dieser Hochtemperaturnäherung der Debye-Funktion ergibt sich für die Computer-Simulation ein einfacher Ausdruck für die Schwingungsamplitude:

$$\sqrt{\overline{u^2}} = \frac{3\ \hbar}{\sqrt{M_2 k_B} \cdot T_D} \cdot \sqrt{T} \qquad (5.17)$$

Der Fehler für die Amplitude ist in dieser Näherung bei niedrigen Temperaturen T:

| T | 4oo K ($T_D$) | 2oo K ($T_D/2$) |
|---|---|---|
| Fehler | 2 % | 11 % |

Die Hochtemperaturnäherung kann daher mit hinreichender Genauigkeit bis herunter zu $T_D/2$ benützt werden.

Unter der Annahme der Gleichverteilung der thermischen Schwingungen gilt für die mittlere Auslenkung in eine Koordinatenrichtung:

$$\overline{u_x^2} = 1/3 \cdot \overline{u^2}$$

Für Nickel ergibt sich:

$$\sqrt{\overline{u_x^2}} = 4 \cdot 1o^{-4}\ \sqrt{T_{[K]}}\ [nm] \qquad (5.18)$$

$$(T \gtrsim 2oo\ K)$$

### 5.4.2 Gitterschwingungen der ersten beiden Atomlagen

Die mittlere Schwingungsamplitude nimmt bei Annäherung an die Oberfläche um bis zu einem Faktor 2 zu und wird dabei anisotrop. Durch Messungen an LEED-Reflexen einer (11o)-Ni-Oberfläche wurde der anisotrope Oberflächen-Debye-Waller-Faktor und daraus die Schwingungsamplituden in der Oberfläche bestimmt (67). Theoretisch beschrieben wurde die Anisotropie und die Tiefenabhängigkeit der Schwingungsamplitude von Wallis (68) und Rovida et al. (69). Von Rovida et al. werden die in Tab. 5.2 dargestellten Verhältnisse $V_{n,i}$ der mittleren quadratischen Auslenkung $\left(\overline{u^2_{n,i}}\right)^{1/2}$ der n-ten Atomlage in Richtung i einer (11o)-Ni-Oberfläche zum Wert $\left(\overline{u^2}\right)^{1/2}$ im Inneren des Kristalls angegeben:

Tab. 5.2

| Schwingungs-richtung ⟶ | $V_{n,1}$ ⊥ | $V_{n,2}$ ∥ [1$\bar{1}$o] | $V_{n,3}$ ∥[oo1] | $V_{n,4}$ ∥[$\bar{1}$11] |
|---|---|---|---|---|
| 1. Atomlage | 1.79 | 1.15 | 1.87 | 1.29 |
| 2. Atomlage | 1.21 | 1.o2 | 1.11 | 1.o3 |
| 3. Atomlage | 1.o9 | 1.oo | 1.o2 | 1.oo |
| 4. Atomlage | 1.o2 | 1.oo | 1.o1 | 1.oo |
| 5. Atomlage | 1.o1 | 1.oo | 1.oo | 1.oo |

Gl. 5.9 wird damit verallgemeinert zu:

$$\sqrt{\overline{u^2_{n,i}}} = V_{n,i} \cdot 4 \cdot 1o^{-4} \sqrt{T_{[K]}} \text{ [nm]} \qquad (5.19)$$

Für n = 1, 2 wurden die Werte aus dieser Tabelle verwendet. Für n ≥ 3 wurde die Anisotropie vernachlässigt ($u_{n,i} = 1$ für n ≥ 3). In der letzten Spalte der Tabelle wurde die bei der [1$\bar{1}$2]-Einschußrichtung wirksame Auslenkung $V_{n,4}$ in [$\bar{1}$11]-Richtung parallel zur Oberfläche eingetragen.

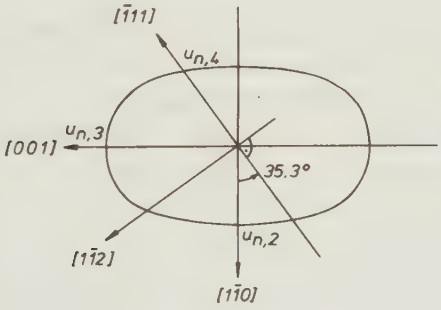
Diese Auslenkung wurde aus dem elliptischen Zusammenhang

$$u_{n,4}^2 = u_{n,2}^2 \cdot \cos^2\varphi + u_{n,3}^2 \cdot \sin^2\varphi$$

mit

$$\varphi = \arctan\left(\frac{u_{n,2}}{u_{n,1}} \cdot \tan 35.3^o\right)$$

berechnet, wobei $35.3^o$ der Winkel zwischen der $[1\bar{1}o]$- und der $[\bar{1}11]$-Richtung in der Oberfläche ist:




Die Wahrscheinlichkeit $\omega_{(u)} \cdot du$, daß ein Gitteratom gerade so ausgelenkt ist, daß es sich im Intervall du um u befindet, wird durch die Gauß-Verteilung

$$\omega_{(u)} \cdot du = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\overline{u^2}}} \cdot e^{-u^2/(2 \cdot \overline{u^2})} \cdot du \qquad (5.2o)$$

beschrieben. Darin ist $\sqrt{\overline{u^2}}$ die Standardabweichung dieser Verteilung. Die Konstante $1/\sqrt{2\pi}$ ist so gewählt, daß die Wahrscheinlichkeit, das Gitteratom überhaupt bei irgendeiner Auslenkung vorzufinden, 1 ist:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \omega(u)\, du = 1$$

Im Programm werden zunächst nach der Polarmethode (7o) Gauß-verteilte Zufallszahlen mit dem Erwartungswert O und der Standardabweichung 1 erzeugt. Diese werden anschließend mit den Standardabweichungen $\left(\overline{u^2_{n,i}}\right)^{1/2}$ nach Gl.5.19 multipliziert. Die so berechneten thermischen Auslenkungen sind wieder Gauß-verteilt mit der Standardabweichung $\left(\overline{u^2_{n,i}}\right)^{1/2}$(71), wie von Gl. 5.2o gefordert.

### 5.4.3 Korrelation der Gitterschwingungen

Die thermische Auslenkung eines Gitteratoms ist i.a. nicht unabhängig von der Auslenkung seiner Nachbaratome. Diese Korrelation zwischen den Gitterschwingungen wirkt sich bei solchen Experimenten aus, bei denen die Streuung eines Projektils durch wenige (1 - 3) Gitteratome erfolgt. Sie wurde deshalb bei der Computer-Simulation der Streuung von niederenergetischen Edelgasionen an Einkristall-Oberflächen berücksichtigt (72,73). Für $T >> T_D$ beträgt der Korrelationskoeffizient zwischen zwei benachbarten Atomen $o.1 \leq \gamma \leq o.25$ (74) je nach Ausbreitungsrichtung der elastischen Welle. Bei n Atomabständen reduziert sich die Korrelation um den Faktor $\gamma^n$. Bei tieferen Temperaturen werden kurze Wellen relativ stärker angeregt als bei hohen Temperaturen. Deshalb sind die Gitterschwingungen für $T \leq T_D$ schon bei kleineren Entfernungen unkorreliert.

Bei der hier betrachteten Reflexion von Ionen mittlerer Energie an Nickel-Atomketten wird der gesamte Ablenkwinkel durch Streuung an vielen (Größenordnung: 5o) Nickelatomen verursacht. Deshalb wurde die Korrelation der Gitterschwingungen vernachlässigt.

### 5.4.4 Schwingungen der adsorbierten Sauerstoffatome

Die adsorbierten Sauerstoffatome können sowohl "reitend" an den Schwingungen des Substrats teilnehmen als auch senkrecht und parallel zur Oberfläche Eigenschwingungen ausführen. Eine experimentell mit HREELS bestimmte Frequenz $\nu$ = 17.4 THz der Eigenschwingung senkrecht zum Substrat wurde für das System O auf Ni (111)von Ibach und Bruchmann (75) angegeben. Dieser Wert ist in guter Übereinstimmung mit einem theoretischen Wert von Black (76). Von Black wird die spektrale Verteilung der Schwingungen des Sauerstoffatoms und die mittleren quadratischen Auslenkungen für den Muldenplatz berechnet. Dabei ergibt sich:

1. Die Substrat-Atome werden in ihrem Schwingungsverhalten nur wenig von den Sauerstoffatomen beeinflußt.
2. Der Beitrag der Eigenschwingungen eines Sauerstoff-Atoms senkrecht und parallel zur Oberfläche zur mittleren quadratischen Auslenkung beträgt weniger als 1o % des Beitrags, der durch die Kopplung an die Schwingungen der Substratatome entsteht.

Punkt 2 wird durch folgende Überlegung verständlich: Die zur Anregung der Normal-Eigenschwingung notwendige Energie ist E = h · 17.4 THz = 72 meV. Diese Energie ist größer als $k_B T \approx 38$ meV (45o K). Daher befindet sich der harmonische Oszillator überwiegend im Grundzustand. In diesem Zustand ist der Erwartungswert $\left(\overline{u^2}\right)^{1/2}$ mit M = 2.68 ·1o$^{-23}$g und $\nu$ = 17.4 THz:

$$\sqrt{\overline{u^2}} = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 M\nu}} = 4.2 \cdot 1o^{-3} \text{ nm}$$

Zusätzlich zu dieser Eigenschwingung "reiten" die Sauerstoffatome auf den Metallatomen der ersten Atomlage. Diese schwingen mit einer Standard-Auslenkung von etwa $1o^{-2}$ nm.

Damit ist die Standard-Auslenkung der Sauerstoffatome insgesamt:

$$\sqrt{\overline{u^2}} = \sqrt{(1o^{-2}\ nm)^2 + (4.2 \cdot 1o^{-3} nm)} = 1.o8 \cdot 1o^{-2}\ nm$$

Das bedeutet, daß die Schwingung der Sauerstoffatome überwiegend durch die Kopplung an das Substrat bestimmt wird.

Diese Aussage wurde für eine (111)-Ni-Oberfläche gewonnen. Entsprechende Berechnungen und Messungen für eine (11o)-Oberfläche bzw. für eine Bindung in der kurzen Brücke liegen nicht vor. In Anlehnung an die zuvor beschriebenen Ergebnisse werden deshalb im Computer-Programm die thermischen Schwingungen des Substrats bei adsorbiertem Sauerstoff unverändert gelassen. Die Sauerstoffatome schwingen mit denselben Auslenkungen wie die Atome der obersten Ebene des Substrats.

## 5.5 ENERGIEVERLUST

Auf seiner Bahn durch den Kristall verliert das Helium-Projektil kinetische Energie durch elastische Stöße mit den Target-Atomkernen (nuklearer Energieverlust) und durch Wechselwirkung mit den Target-Elektronen (elektronischer Energieverlust). Eine Übersicht über die Mechanismen und Theorien des Energieverlusts enthält ein Artikel von Gemmell (66). Für Projektile, die von einem Kristallgitter geführt werden, ist der Energieverlust i.a. verschieden von dem Energieverlust nicht geführter (random-) Teilchen. Zur Untersuchung eines möglichen Einflusses dieses Effekts auf die Streuexperimente kann deshalb im Computer-Programm der Energieverlust wahlweise abhängig oder unabhängig vom Stoßparameter berechnet werden. Die Grundlagen dafür werden im folgenden beschrieben.

### 5.5.1 Empirischer, stoßparameter-unabhängiger Energieverlust

Ziegler (77) hat Energieverlust-Messungen von Heliumprojektilen zwischen 3o keV und 4o MeV in polykristallinem Nickel zusammengefaßt. In Abb. 5.4 ist dieser Energieverlust dE/dZ über der relativen Geschwindigkeit $v/v_B$ aufgetragen. Darin ist $v_B$ die Bohr'sche Geschwindigkeit

$$v_B = e^2/\hbar = 2.2 \cdot 1o^8 \text{ cm/s}$$

Die Energie der He-Ionen kann in guter Näherung durch

$$E = 1oo \text{ keV} \cdot (v/v_B)^2 \qquad (5.21)$$

angegeben werden. Der elektronische Energieverlust ist bis zu etwa 2oo keV proportional zur Geschwindigkeit V, durchläuft bei 1 MeV ein Maximum und fällt darüber wieder ab (Bethe-Bloch-Bereich). Erst bei Energien unter 1o keV wächst der nukleare Energieverlust auf über 1o % des elektronischen Energieverlusts an (77). (Nach Lindhard, Nielsen und Scharff (62) sind der elektronische und der nukleare Energieverlust von derselben Größenordnung, wenn $v \approx o.1 \cdot Z_1^{2/3} \cdot v_B$, entsprechend einer Energie von 2.5 keV für He.) Der nukleare Energieverlust wurde deshalb für die Computer-Simulation vernachlässigt.

Für die in den meisten Experimenten benutzte Einschußenergie von 2oo keV beträgt nach Abb. 5.4 der Energieverlust von He in Ni:

$$\frac{dE}{dZ} = 464 \text{ eV/nm} \qquad (5.22)$$

Unter der Voraussetzung der Geschwindigkeitsproportionalität ergibt sich damit:

$$\frac{dE}{dZ} = 1.o4 \frac{\sqrt{eV}}{nm} \cdot \sqrt{E_{[eV]}} \qquad (5.23)$$

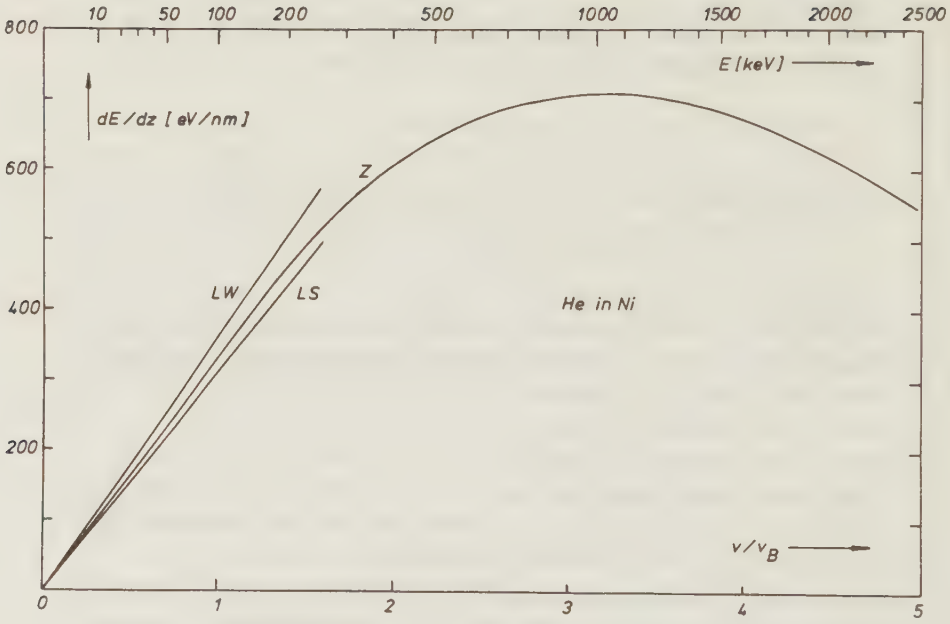



Abb. 5.4 : Elektronischer Energieverlust für He in Ni :
Z : empirische Kurve nach Ziegler
LW : Theorie von Lindhard und Winther
LS : Theorie von Lindhard und Scharff

Nach dieser Beziehung wird im Computer-Programm der stoßparameter-unabhängige Energieverlust berechnet. Er ist nur wirksam, solange sich das Projektil unterhalb der Oberfläche befindet ($Y < 0$).

### 5.5.2 Theorie von Lindhard und Winther

Der Energieverlust von Ionen in einem freien Elektronengas wurde von Lindhard und Winther (78) theoretisch behandelt. Die Kernladung $e \cdot Z_1$ des Projektils wird dabei als lineare Störung des Elektronengases aufgefaßt, das durch eine longitudinale, komplexe Dielektrizitätskonstante beschrieben wird. Das gestörte Elektronengas übt rückwirkend eine Kraft $\vec{F}$ auf das Projektil aus:

$$\vec{F} = Z_1 \cdot e \cdot [\vec{E} - \vec{E}_{vac}]$$

Darin ist $\vec{E}_{vac}$ die Feldstärke im Vakuum am Ort des Projektils. Die Differenz $\vec{E} - \vec{E}_{vac}$ ist die Feldstärke, die die gestörte Elektronendichte am Ort des Projektils erzeugt. Sie ist in der linearen Theorie proportional zu $Z_1$, woraus sich $\vec{F} \sim Z_1^2$ ergibt. Die Forderung, daß die Elektronen als frei betrachtet werden könnnen, wird nach Lindhard und Winther durch das Kriterium

$$x^2 \equiv \frac{v_B}{\pi \cdot v_F} < 1$$

beschrieben. Dabei ist $x^2$ ein Maß für das Verhältnis zwischen der potentiellen Energie zweier benachbarter Elektronen und ihrer kinetischen Energie. Diese Bedingung ist für Ni mit der Fermi-Geschwindigkeit $v_F = 1.06\ v_B$ erfüllt. Für den Energieverlust gilt :

$$\frac{dE}{dZ} = \frac{4 \pi Z_1^2 e^4}{m_e \cdot v^2} \cdot n \cdot L \qquad (5.24)$$

wobei $m_e$ die Elektronenmasse, v die Projektilgeschwindigkeit und n die Dichte des Elektronengases ist. Für die Funktion L gilt nach Lindhard und Winther bei kleinen Geschwindigkeiten v:

$$L = \left(\frac{x^2}{3}\right)^{3/4} \cdot C_1(x) \cdot y^{3/2} \qquad (5.25)$$

Darin ist

$$x^2 \equiv \frac{v_B}{\pi v_F} \qquad (5.26)$$

$$v_F = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} : \text{Fermigeschwindigkeit}$$

$$y = \frac{\sqrt{3}}{x}\left(\frac{v}{v_F}\right)^2$$

Werte für die Funktion $C_1(x)$ können einer graphischen Darstellung in (77) entnommen werden.

Die Elektronendichte in Nickel ist (79)

$$n = 2.74 \cdot 10^{-4}\ nm^{-3}$$

Die Fermigeschwindigkeit ist damit

$$v_F = 2.33 \cdot 10^8\ cm/s = 1.07\ v_B$$

Mit Gl. 5.26 ist

$$x^2 = 0.3 \qquad (5.27)$$

Aus Figur 2 in (78) folgt für den Ausdruck in Gl. 5.25 :

$$\left(\frac{x^2}{3}\right)^{3/4} \cdot C_1(x) = 0.0715$$

Damit wird

$$L = 0.337 \cdot (v/v_B)^3$$

Mit Gl. 5.24 ergibt sich für den Energieverlust von He in Ni:

$$\frac{dE}{dz} = 360 \text{ eV/nm} \cdot \frac{v}{v_B}$$

$$= 1.14 \frac{\sqrt{\text{eV}}}{\text{nm}} \cdot \sqrt{E_{[\text{eV}]}} \qquad (5.28)$$

Die Beziehung ist in Abb. 5.4 zusammen mit der empirischen Kurve von Ziegler dargestellt. Aus numerischen Werten, die von Lindhard und Winther für die Funktion L angegeben werden, kann für $x^2 = 0.31623$ entnommen werden, daß eine Abweichung von der Geschwindigkeitsproportionalität ab etwa $v = 1.5\ v_F$ ($\hat{=}$ 250 keV für He in Ni) eintritt. Dies stimmt mit der empirischen Kurve von Ziegler (Abb. 5.4) überein. Die Werte nach Gl. 5.28 liegen jedoch um etwa 10 % höher als die empirischen Werte nach Gl. 5.23.

### 5.5.3 Stoßparameter-abhängiger Energieverlust

Die empirische Kurve von Ziegler und die Theorie von Lindhard und Winther gelten für ein polykristallines Target oder für einen Einkristall bei Einschuß in random-Richtung. Bei Gitterführungsbedingungen können jedoch in einem entsprechenden Experiment Projektile mit kleinem oder auch großem mittlerem Stoßparameter ausgewählt werden. Ihr Energieverlust ist proportional zur mittleren Dichte der zum Energieverlust beitragenden Elektronen und damit wie diese Stoßparameter-abhängig.

Ein theoretischer Ausdruck für einen Stoßparameter-abhängigen Energieverlust wurde von Firsov (80) angegeben. In der Herleitung wird vorausgesetzt, daß die Stoßpartner durch

das statistische Thomas-Fermi-Atommodell beschrieben werden können und sich in ihren Kernladungszahlen um nicht mehr als einen Faktor 4 unterscheiden. Diese Voraussetzungen sind für He in Ni ($Z_1 = 2$, $Z_2 = 28$) nicht erfüllt. Wird für diesen Fall der Energieverlust nach Firsov berechnet, so ergibt sich bei einer Energie von 2oo keV ein Wert von 2 keV/nm, der etwa 4 mal größer ist als der empirische Wert. Die Firsov'sche Theorie wurde deshalb nicht für die Computer-Simulation verwendet.

Oen und Robinson (81) haben wegen der Nichtanwendbarkeit der Firsov'schen Theorie für leichte Ionen in Targets mit mittlerer Kernladungszahl ($Z_1 < 1/4\ Z_2$) angenommen, daß der Energieverlust $\Delta E$ pro Stoß vom Stoßparameter $b \approx s = \sqrt{x_o^2 + y_o^2}$ durch die Beziehung

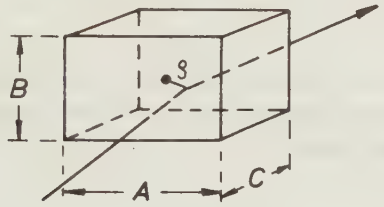
$$\Delta E \sim \exp(-o.3\ b/a_{TF}) \tag{5.28}$$

beschrieben werden kann ($a_{TF}$ ist der Thomas-Fermi-Abschirmradius). Diese räumliche Abhängigkeit des Energieverlusts soll annähernd der Elektronendichte der Targetatome folgen. Die Autoren geben an, daß die Wahl dieser Stoßparameter-Abhängigkeit jedoch beliebig ist, da entsprechende Theorien nicht genügend entwickelt sind. Im Computer-Programm besteht die Möglichkeit der Wahl eines Energieverlusts nach Gl. 5.28 oder eines Stoßparameter-unabhängigen Energieverlusts nach Gl. 5.23. Für den geschwindigkeitsproportionalen Energieverlust pro Stoß mit einem einzelnen Targetatom ergibt sich nach Gl. 5.28:

$$\Delta E_{(\rho)} = k \cdot \sqrt{E_{[eV]}} \cdot \exp(-o.3\ \rho) \tag{5.29}$$

Darin ist $\rho = b/a_{TF} \approx s/a_{TF}$ und k eine Normierungskonstante. Wird dieser Energieverlust über den Querschnitt einer Streuzelle gemittelt, so zeigt sich, daß er am Rande der

Zelle noch nicht auf vernachlässigbare Werte abgefallen ist. Um dennoch den empirischen random-Energieverlust nach Gl. 5.23 zu erhalten, muß die Normierungskonstante k in Gl. 5.29 von den Dimensionen der Streuzelle abhängen. Diese sind je nach Einschußrichtung unterschiedlich. Die Konstante k wird im folgenden berechnet:




Der über die Fläche A·B der Streuzelle gemittelte Stoßparameter-abhängige Energieverlust pro Stoß ist mit Gl. 5.29:

$$\overline{\Delta E} = \frac{1}{AB} \cdot 4 \cdot \int_0^{A/2} \int_0^{B/2} \Delta E_{(\rho)} \, dx \, dy$$

$$= \frac{1}{AB} \; 4 \cdot k \cdot \sqrt{E} \int_0^{A/2} \int_0^{B/2} \exp\left[-\frac{o.3}{a_{TF}} \sqrt{x^2+y^2}\right] dx \, dy \qquad (5.3o)$$

Er soll gleich sein dem empirischen random-Energieverlust nach Gl. 5.23 beim Durchlaufen der Strecke C:

$$\overline{\Delta E} = o.1o4 \, \frac{\sqrt{eV}}{A} \cdot \sqrt{E} \cdot C \qquad (5.31)$$

Das Integral in Gl. 5.3o wurde numerisch berechnet. Daraus ergeben sich mit Gl. 5.31 die Normierungskonstanten k in Gl. 5.29 für die verschiedenen Einschußrichtungen:

| Richtung: | $[1\bar{1}o]$ | [oo1] | $[1\bar{1}2]$ |
|---|---|---|---|
| $k_{[\sqrt{eV}]}$ | o.94 | 1.o1 | 1.49 |

### 5.5.4 Energieverlust beim Stoß mit einem Sauerstoffatom

Der Beitrag der Sauerstoffatome zum gesamten Energieverlust ist i.a. klein, besonders dann, wenn das Projektil die Oberfläche durchdrungen hat. Dieser Energieverlust kann nicht nach Lindhard und Winther berechnet werden, da diese Theorie von einem Elektronengas ausgeht, das zur Beschreibung einzelner, adsorbierter Sauerstoffatome nicht geeignet ist.

Um den Energieverlust eines Projektils mit der Kernladungszahl $Z_1$ in einem Medium (Festkörper oder Gas) der Kernladungszahl $Z_2$ zu berechnen, haben Lindhard und Scharff (82) eine Beziehung angegeben:

$$\frac{dE}{dZ} = N \cdot S_e = N \cdot Z_1^{1/6} \cdot 8\pi\ e^2\ a_o (Z_1 Z_2 / Z) \cdot v/v_o \qquad (5.32)$$

Darin sind:

$a_o = \hbar^2/me^2 = 0.0529$ nm (Bohr'scher Radius)

$Z = (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{3/2}$

$N$ : Atomzahldichte des Bremsmediums (Ni: 91.26 Atome/nm$^3$)

$S_e$ : Bremsvermögen des Mediums

Gl. 5.3.2 wurde aus dem Thomas-Fermi-Atommodell hergeleitet. Sie wird von den Autoren als Notbehelf für einfache Abschätzungen bezeichnet. Ihre Übereinstimmung mit empirischen Werten liegt bei 20 % (66). Sie gilt im Bereich $v < v_B \cdot Z_1^{2/3} \approx 1.6\ v_B$ (He). Diese Grenze stimmt überein mit der Grenze des geschwindigkeitsproportionalen Bereichs im empirischen Energieverlust nach Abs. 5.5.1 (Abb. 5.4).

Mit Gl. 5.32 ergibt sich für ein 200 keV-He-Projektil in Nickel:

$$\frac{dE}{dZ} = 435 \text{ eV/nm}.$$

Dieser Wert stimmt annähernd überein mit dem empirischen Wert nach Ziegler von 464 eV/nm und dem Wert nach der Theorie von Lindhard und Winther, Gl. 5.27, von 51o eV/nm.

Das Bremsvermögen $S_e$ von Sauerstoff ($Z_2 = 8$) für ein He-Projektil ($Z_1 = 2$) ist mit Gl. 5.32:

$$S_e = \frac{v}{v_o} \cdot 2.6 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2 = \sqrt{E_{[eV]}} \cdot o.oo822 \quad \sqrt{eV} \cdot \text{nm}^2$$

Das Bremsvermögen $S_e$ ist mit dem stoßparameterabhängigen Energieverlust $\Delta E(\rho)$ für den Stoß mit einem Atom verknüpft nach:

$$S_e = 2\pi \int_o^\infty \Delta E(\rho) \cdot \rho \cdot d\rho$$

Mit Gl. 5.29 ergibt sich daraus:

$$S_e = 2\pi \, k_{ox} \cdot \sqrt{E_{[eV]}} \int_o^\infty \exp(-o3\rho/a_{TF}) \cdot \rho \cdot d\rho$$

$$= k_{ox} \cdot \frac{\pi \cdot a_{TF}^2}{o.o45} \cdot \sqrt{E_{[eV]}} \quad , \qquad (5.33)$$

wobei nach Gl. 5.14 für $Z_1 = 2$ und $Z_2 = 8$ gilt:

$$a_{TF} = o.o198 \text{ nm}$$

Im Gegensatz zur Streuung an Nickelatomen wurde bei der Integration in Gl. 5.33 auf die Berücksichtigung des Einflusses der Streuzellen-Grenzen verzichtet, da diese Beziehung nur als Abschätzung dient und der Energieverlust an Sauerstoffatomen für die meisten Projektilbahnen klein ist. Durch Vergleich von Gl. 5.32 mit Gl. 5.23 ergibt sich:

$$k_{ox} = o.3o \sqrt{eV}$$

Also gilt für den Energieverlust beim Stoß mit einem Sauerstoffatom:

$$\Delta E = o.3o \sqrt{eV} \cdot \exp(-o.3\rho/a_{TF}) \cdot \sqrt{E_{[eV]}} \qquad (5.34)$$

## 5.6 KINETISCHE EMISSION VON SEKUNDÄRELEKTRONEN (TARGETSTROM)

Der auf die Kristalloberfläche auftreffende Ionenstrahl erzeugt dort einen nach Erde abfließenden positiven Strom $I_T$. Die Ursache dafür ist der positive Ionenstrom $I_1$ selbst, vermindert um den Strom $I_2$ der gestreuten, nicht neutralisierten Ionen, und der Strom der Sekundärelektronen $I_3$:

$$I_T = (I_1 - I_2) + I_3$$

Bei streifendem Einfall liegt das Verhältnis der pro einfallendem Ion erzeugten Sekundärelektronen $I_3/I_1$ je nach seitlichem Einschußwinkel $\Theta$ zwischen 35 und 5o bei axialer Gitterführung ($\phi = 1^o$) und zwischen 15 und 2o bei planarer Gitterführung ($\phi = 5^o$). Der Targetstrom wird also überwiegend durch die Sekundärelektronen-Emission bestimmt:

$$I_T \approx I_3$$

Bei kleinen Einschußwinkeln $\phi$ ($\approx 1^o$) trifft ein Anteil des Strahls auf die Stirnfläche des Kristalls, der vergleichbar ist mit dem Teil des Strahls, der auf die Oberfläche einfällt. Die von diesem Teil erzeugten Ströme tragen ebenfalls zum Targetstrom bei. Diese Ströme können u.U. durch Gitterführungseffekte an der Stirnfläche orientierungsabhängig sein. Da jedoch bei senkrechtem Auftreffen die Sekundärelektronen-Ausbeute nur von der Größenordnung des Ionenstroms ist, können diese Ströme gegenüber der starken Sekundärelektronen-Emission der streifend getroffenen, zu untersuchenden Oberfläche vernachlässigt werden.

Nach Sternglass (83) kann man für die Anzahl niederenergetischer Sekundärelektronen n, die im Mittel pro Stoß

mit einem Targetatom durch direkte Wechselwirkung der Targetelektronen mit dem Ion erzeugt werden, schreiben:

$$n = \Delta E_s / E_o$$

Dabei ist $\Delta E_s$ der Teil des Energieverlusts pro Stoß, der die Auslösung der Sekundärelektronen bewirkt und $E_o$ die Energie, die zur Auslösung eines Elektrons benötigt wird. Baragiola et al. (84) setzten $\Delta E_s$ gleich dem elektronischen Energieverlust $\Delta E$ pro Stoß:

$$n = \Delta E / E_o$$

Von den auf diese Art im Kristall erzeugten Sekundärelektronen können wegen der elastischen Streuung und inelastischen Adsorption nur die im Oberflächenbereich ($Y \gtrsim -1$ nm) entstandenen Sekundärelektronen den Kristall verlassen.

Im Computer-Programm wurde vereinfachend nicht die absolute Zahl, sondern ein relatives Maß EOUTC für die Sekundärelektronenproduktion pro Stoß berechnet:

$$EOUTC = \Delta E \cdot \exp(Y/\lambda) \qquad (5.35)$$

Dabei ist $\Delta E$ der geschwindigkeitsproportionale elektronische Energieverlust nach Gl. 5.23 bzw. Gl. 5.29 und Gl. 5.34, und $\lambda = 1$ nm die mittlere Ausdringtiefe von Elektronen bei einer Energie von 2o eV. Y ist der Abstand zur Oberfläche. Im Inneren des Kristalls ist $Y < O$.

Gl. 5.35 berücksichtigt nicht anisotrope Effekte durch elastische Streuung der Elektronen und den Einfluß der Potentialschwelle der Oberfläche. Diese Effekte sind im Einzelnen von U.v. Gemmingen untersucht worden (85,86).

Durch Summieren über alle Stöße entsteht nach Gl. 5.35 ein relatives Maß für den Targetstrom, das die Untersuchung des Einflusses der Ionenbahnen bzw. der Einschußbedingungen auf den Targetstrom zuläßt.

## 5.7 NEUTRALISATION

In einem He-Ionenstrahl nach Durchtritt durch eine Kohlenstoff-Folie sind die Anteile an geladenen ($Y^+$) und ungeladenen He-Teilchen ($Y^o$) von Marion und Young für einen Energiebereich von o - 2 MeV angegeben worden (87). Diese Angaben stützen sich auf Messungen von Armstrong et al. (88), die jedoch nur im Energiebereich 2oo keV bis 6.5 MeV durchgeführt wurden. Diese Daten wurden von Marion und Young im Energiebereich unter 2oo keV ohne Angabe einer zugrunde liegenden Theorie extrapoliert. Sie weichen dort von experimentellen Daten von Kreußler (89) ab, die im folgenden diskutiert werden:

Kreußler hat den Ladungsanteil von H-, D- und He-Projektilen nach Durchtritt durch Folien aus verschiedenen Materialien (C, Al, Au, Cs) im Energiebereich 5o keV bis 2oo keV gemessen. Wegen des geringen Anteils zweifach geladener He-Ionen in diesem Bereich wurde nicht zwischen diesen und den einfach geladenen Ionen unterschieden. Der Ladungsaustausch von Protonen der Geschwindigkeit $v \gtrsim v_B$ wurde durch theoretische Modelle beschrieben, auf die im folgenden zurückgegriffen wird. Aus den Experimenten von Kreußler kann entnommen werden, daß der Ladungsanteil der He-Projektile im Bereich der Austrittsenergien von 5o - 2oo keV unabhängig vom Folienmaterial ist und auch keine Unterschiede zwischen senkrechtem Austritt und einem Austrittswinkel bis $6o^o$ zur Foliennormalen feststellbar waren.

In Abb. 5.5 wird gezeigt, daß sich das Ladungsverhältnis $Y^+/Y^o$, das sich aus den Experimenten von Kreußler ergibt, für Geschwindigkeiten $v \lesssim 1.4\ v_B$ empirisch darstellen läßt als

$$Y^+/Y^o = 0.6\left[\frac{E_{[keV]}}{100\ keV}\right]^{3/2}$$

$$= 0.6\ \left(\frac{v}{v_B}\right)^2 \quad , \tag{5.36}$$

wobei $v_B = 2.2 \cdot 10^8$ cm/s die Bohr'sche Geschwindigkeit ist. Wenn vernachlässigt wird, daß mit zunehmender Energie ein geringer Teil der He-Ionen zweifach geladen ist, folgt aus Gl. 5.36 mit $Y^o+Y^+ = 1$:

$$Y^+ = 1/[1 + \frac{1}{0.6\,(v/v_B)^3}]$$

$$\text{bzw.} \qquad Y^o = 1/[1 + 0.6(v/v_B)^3] \tag{5.37}$$

Für $v << v_B$ gilt:

$$Y^+ \approx 0.6\ \left(\frac{v}{v_B}\right)^3 \tag{5.38}$$

Eine Unabhängigkeit des Ladungsverhältnisses $Y^+/Y^o$ von Folienmaterial und Austrittswinkel deutet nach Kreußler und Sizmann (89) auf ein Gleichgewicht zwischen Elektronenabstreif- und -einfangprozessen im Elektronengas-Ausläufer der Oberfläche hin. Der konkurrierende Effekt dieser beiden Mechanismen kann durch die Differentialgleichung

$$\frac{dY^+(x)}{dx} = [\sigma_1 \cdot Y^o_{(x)} - \sigma_c \cdot Y^+_{(x)}] \cdot \rho =$$

$$= [\sigma_1 - (\sigma_1 + \sigma_c) \cdot Y^+_{(x)}] \cdot \rho \tag{5.39}$$

beschrieben werden. Darin sind $\sigma_1$ bzw. $\sigma_c$ die Wirkungsquerschnitte für Elektronenverlust bzw. -einfang, $\rho$ die lokale Elektronendichte und $Y^o_{(x)} = 1 - Y^+_{(x)}$. Die x-Achse beschreibt

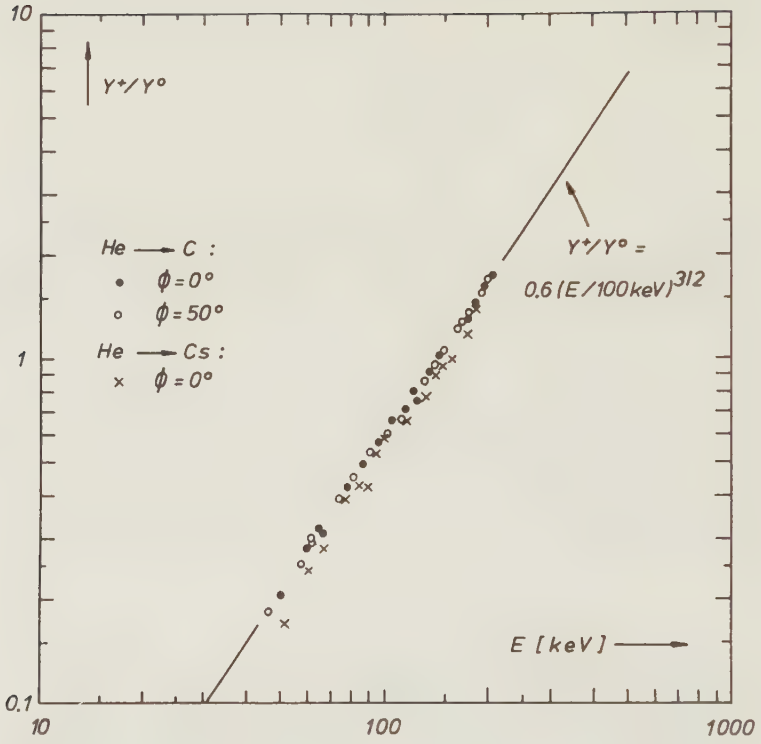



Abb. 5.5 : Ladungsverhältnis von He nach Durchtritt durch Folien

die Flugrichtung. Im Fall eines Gleichgewichts ist $dY^+_{(x)}/dx = 0$. Aus Gl. 5.39 folgt damit:

$$Y^+ = (1 + \frac{\sigma_c}{\sigma_1})^{-1}$$

oder

$$\frac{Y^+}{Y_o} = \frac{\sigma_1}{\sigma_c} \qquad (5.4o)$$

Für $v \lesssim v_B$ gilt mit Gl. 5.36:

$$\frac{Y^+}{Y^o} = \frac{\sigma_1}{\sigma_c} = o.6\ (v/v_B)^3 \qquad (5.41)$$

Falls beide Wirkungsquerschnitte gleichartige Funktionen der lokalen Elektronendichte $\rho$ sind (z.B. lineare), so ist nach Gl. 5.4o der Ladungsanteil $Y^+$ im Gleichgewicht unabhängig von $\rho$. Von Kreußler wurden Materialien mit größtmöglichem Unterschied in der Elektronendichte verwendet. Die Materialunabhängigkeit der Ergebnisse für $Y^+$ im Bereich $v \lesssim 1.4\ v_B$ (Abb. 5.5) ist daher eine Folge des Gleichgewichts.

Nach Gl. 5.4o ist $Y^+$ im Fall des Gleichgewichts auch unabhängig von der im Elektronengas zurückgelegten Strecke. Wenn sich dieses Gleichgewicht bereits bei senkrechtem Austritt aus der Folie eingestellt hat, so ändert sich $Y^+$ nicht mehr, wenn diese Strecke durch Drehen der Folie um z.B. $6o^o$ vergrößert wird. Dies wurde von Kreußler beobachtet (Abb. 5.5).

Die empirische Beziehung Gl. 5.36 wurde im Computer-Programm zur Berechnung des Anteils der gestreuten $He^+$-Ionen verwendet. Die damit bei sehr flachen Austrittswinkeln zu einer Ni-Oberfläche ($\approx 1^o$) berechneten Werte sind in Übereinstimmung mit entsprechenden Experimenten von Erasmus (9o) und Winter (91).

## 5.8 LICHTANREGUNG DES $He^+$-468.6 nm-ÜBERGANGS

Relative Lichtausbeuten für diesen Übergang nach Anregung durch Kohlenstoff-Folien sind von Truckenbrodt und Varelas (14) und Dynefors et al. (92) angegeben worden. In den Experimenten von Truckenbrodt und Varelas wurden die Lichtausbeuten des $He^+$-468.6 nm- und des $He^O$-587.6 nm-Übergangs (siehe Abb. 5.11) in Bezug auf die Energie des Projektils hinter der Folie gemessen. In den früheren Experimenten von Dynefors et al. wurden die Lichtausbeuten dagegen in Bezug auf die Energie des einfallenden Strahls angegeben. Diese Energiewerte wurden deshalb für den folgenden Vergleich um den Energieverlust bei Annahme einer 1o $\mu g/cm^2$-Kohlenstoff-Folie korrigiert (77). Für den 468.6 nm-Übergang des $He^+$-Ions stimmt die Abhängigkeit der Lichtausbeute I von der Austrittsenergie E bzw. der Austrittsgeschwindigkeit v zwischen den Experimenten von Truckenbrodt und Varelas bzw. Dynefors et al. überein (Abb. 5.6). Empirisch gilt näherungsweise:

$$I \sim E^{3/2} \sim v^3 \qquad (5.42)$$

Nach dieser Beziehung weist die $He^+$-Lichtausbeute dieselbe Energie- bzw. Geschwindigkeitsabhängigkeit auf wie der positive Ladungsanteil $Y^+$ ind Gl. 5.41. Dies legt eine enge Beziehung zwischen dem Neutralisationsprozeß und der Lichtanregung nahe. Eine Erklärung für diese Beziehung wird im folgenden vorgeschlagen:

Bei der Beschreibung des positiven Ladungsanteils durch Gl. 5.39 sind Einfang- und Abstreifprozesse zwischen allen angeregten und nicht angeregten Zuständen sowohl des He-Atoms als auch des Ions einbezogen. Falls auch ein Gleichgewicht zwischen dem angeregten Zustand $He^+$- n =4 und dem Zustand i des neutralen He-Atoms existiert, gilt:

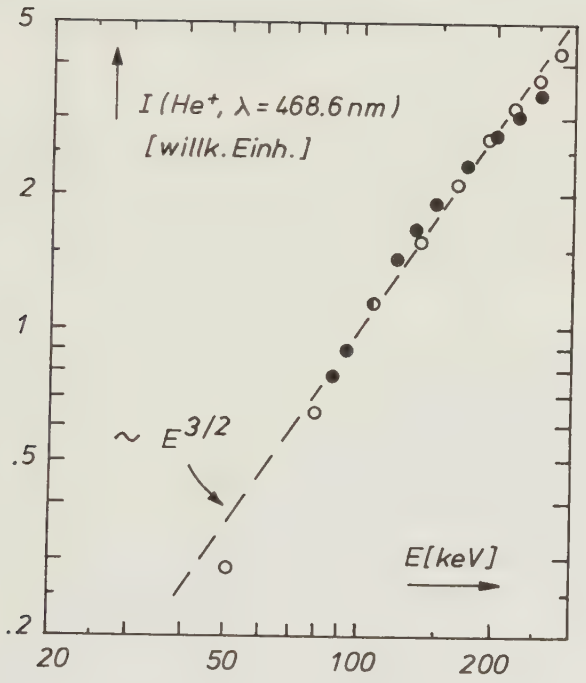



Abb. 5.6 : $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute nach Durchtritt durch Kohlenstoff - Folien
- ● nach Truckenbrodt und Varelas
- o nach Dynefors et al.

$$Y^{+}_{n=4} \; / \; Y^{o}_{i} \;=\; \sigma_{l,n=4} \; / \; \sigma_{c,n=4}$$

Unter der Voraussetzung, daß sich diese Wirkungsquerschnitte nur durch Konstanten von den pauschalen Wirkungsquerschnitten in Gl. 5.41 unterscheiden, nicht aber in der Geschwindigkeitsabhängigkeit, ergibt sich für Geschwindigkeitsabhängigkeit der Besetzungswahrscheinlichkeit des $He^{+}$- n = 4-Niveaus ebenfalls eine $v^3$-Abhängigkeit.

Die experimentellen Ergebnisse, die in Abs. 8.2.3 beschrieben werden, zeigen, daß ein Auger-Abregungs- oder Resonanz-Ionisations-Mechanismus nach Hagstrum (93) für die Überlebenswahrscheinlichkeit des $He^{+}$ - 468.6 nm-Übergangs nach

$$W = \exp\,(-v_c/v_\perp) \qquad (5.43)$$

auftritt. Darin ist $v_c$ eine kritische Geschwindigkeit und $v_\perp$ die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Oberfläche. Ein entsprechender Mechanismus wurde für die H-Balmer-α-656.3 nm-Strahlung von Leung et al. (94) mit $v_c = 1.6 \cdot 10^8$ cm/s und für die H-Balmer-β-468.1 nm-Strahlung von Kerkdijk et al. (95) mit $v_c = 1.5 \cdot 10^8$ cm/s gefunden. Die beste Anpassung der Computer-Simulation an das Experiment in Abs. 8.2.2 wurde für das Wasserstoff-ähnliche $He^{+}$-Ion (468.6 nm) mit $v_c = 2.5 \cdot 10^7$ cm/s erhalten. Dieser Wert ist deutlich kleiner als die obigen Werte für Wasserstoff. Deswegen ist der Einfluß dieses Abregungsmechanismus auf die $He^{+}$-Lichtanregung nach Durchtritt durch Folien (Abb. 5.6) vernachlässigbar. Dagegen ist er wichtig für Teilchen, die die Kristalloberfläche unter streifendem Winkel verlassen (Abb. 5.8).

Nach Abs. 8.2.3 kann der Abregungsmechanismus des $He^{+}$-468.6 nm-Übergangs auch bei streifend austretenden Ionen dann ver-

nachlässigt werden, wenn die Ionen durch Stöße mit adsorbierten Atomen angeregtwurden. Da die bei den Experimenten i.a. vorhandene Restgasbedeckung von etwa o.1 Monolagen genügt, um die meisten der streifend austretenden Ionen anzuregen, wurden die Computer-Simulationen zur $He^+$-Lichtemission ohne diesen Abregungsmechanismus durchgeführt, wenn nichts anderes erwähnt ist.

## 5.9 LICHTANREGUNG DES $HE^O$- 587.6 nm-ÜBERGANGS

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Lichtemission des $He^O$-587.6 nm-Übergangs läßt sich zurückführen auf einen Faktor, der dem Anteil an Neutralteilchen proportional ist und einem Abregungsmechanismus entsprechend Gl.5.43. Lichtausbeuten für diesen Übergang wurden von Bickel et al. (96) und Truckenbrodt und Varelas (14) nach Anregung durch Kohlenstoff-Folien gemessen. Diese Werte wurden für die Darstellung in Abb. 5.7 zunächst durch den Neutralanteil nach Kreußler (89) dividiert. Die Energiewerte bei Bickel et al. wurden, wie im vorigen Abschnitt, um den Energieverlust in einer 1o $\mu g/cm^2$-Folie korrigiert. Die Ergebnisse sind in einer halblogarithmischen Darstellung über der inversen Geschwindigkeit hinter der Folie in Abb. 5.7 aufgetragen. Es ergibt sich eine Gerade, die charakteristisch ist für einen Auger-Abregungs- oder Resonanz-Ionisations-Mechanismus nach Gl. 5.43 mit einer kritischen Geschwindigkeit $v_c = 1.2 \cdot 1o^8$ cm/s. Dieser Wert ist vergleichbar mit Werten für $v_c$ zwischen 1 und $3 \cdot 1o^8$ cm/s, die von Baird et al. für diesen Übergang gemessen wurden (97).

Die Lichtausbeute für den $He^O$-Übergang ist damit

$$I \sim Y^O \cdot \exp(- v_\perp / v_c) \qquad (5.44)$$

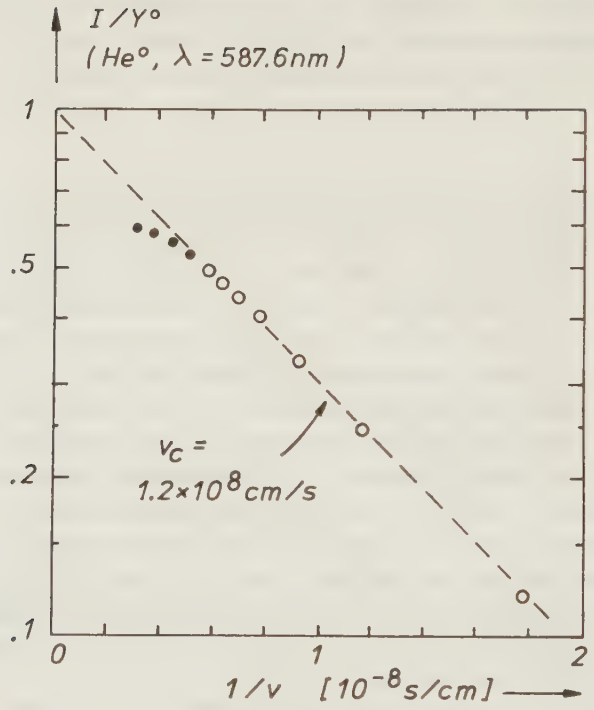



Abb. 5.7 : $He^{o}$ - 587.6 nm - Lichtausbeute nach Durchtritt durch Kohlenstoff - Folien, bezogen auf den Neutralanteil $Y_o$ , als Funktion der inversen Projektilgeschwindigkeit 1/v

- • nach Truckenbrodt und Varelas
- o nach Bickel et al.

mit $Y^{o}$ aus Gl. 5.37. Zum Vergleich besteht in der Computer-Simulation die Möglichkeit, statt der Normalkomponente $v_{\perp}$ die Projektil-Geschwindigkeit v einzusetzen:

$$I \sim Y^{o} \cdot \exp(- v/v_{c}) \qquad (5.45)$$

In Abs. 8.3.2 wird beschrieben, daß sich jedoch nur Gl. 5.44 zur Beschreibung der Experimente eignet. Das Auftreten der Normalkomponente der Austritts-Geschwindigkeit $v_{\perp}$ in Gl.5.44 bedeutet, daß Projektile mit kleinen Austrittswinkeln $\phi_{aus}$ einer starken Abregung unterliegen. Dieses Verhalten zeigt Abb. 5.8 für den $He^{+}$-468.6 nm- und den $He^{o}$-587.6 nm-Übergang. Die Überlebenswahrscheinlichkeiten W nach G. 5.43 sind als Funktion von $\phi_{aus}$ für gestreute Teilchen mit einer Austrittsenergie von 2oo keV dargestellt.

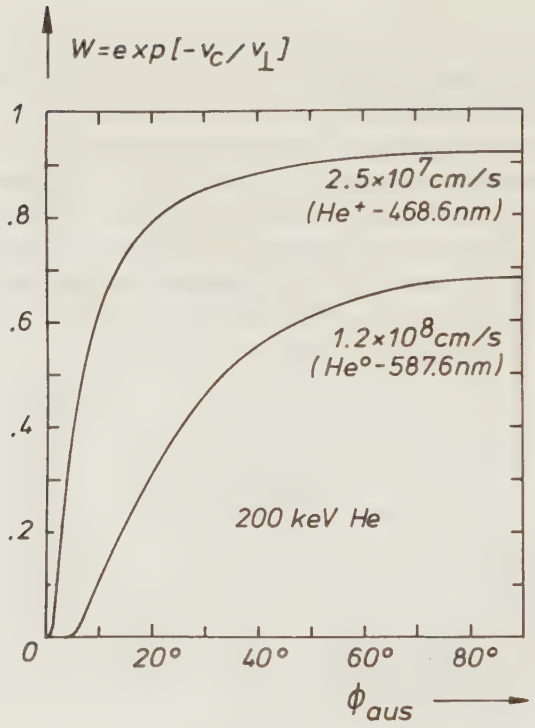



Abb. 5.8 : Überlebenswahrscheinlichkeit W der Lichtanregung von 200 keV He - Projektilen als Funktion des Austrittswinkels $\phi_{aus}$ zur Oberfläche

# 6. ERGEBNISSE VON COMPUTER-SIMULATIONEN UND IONEN-STREUEXPERIMENTEN

## 6.1 KORRELIERTE STREUUNG AN EINER ATOMKETTE

Schnelle Ionen, die streifend auf eine Atomkette einfallen, können unter Erhaltung ihrer Querenergie von der Kette spiegelnd reflektiert werden. Die gesamte Ablenkung setzt sich dabei zusammen aus sukzessiven, korrelierten Kleinwinkelstreuungen an vielen Atomen. Diese Erscheinung wird als axiale Gitterführung bezeichnet (98-1oo). Sie tritt auf, wenn der Einfallswinkel $\psi$ der Ionen zur Atomkette ($\psi^2 \approx \phi^2 + \theta^2$) kleiner ist als ein kritischer Winkel $\psi_c$. In erster Näherung gilt nach Lindhard (98):

$$\psi_c = \sqrt{\frac{2\, Z_1\, Z_2\, e^2}{E \cdot d}} \qquad (6.1)$$

Darin sind $Z_1$ bzw. $Z_2$ die Kernladungszahlen des Projektils bzw. der Atome der Kette, E die Energie des Ions und d der Atomabstand in der Kette. Die streuende Atomkette kann sowohl aus Metallatomen des Kristalls als auch aus adsorbierten Atomen bestehen. Für 2oo keV-He-Ionen ($Z_1 = 2$), die an Ni- bzw. O-Ketten gestreut werden ($Z_2 = 28$ bzw. 8) ergeben sich aus Gl. (6.1) folgende kritische Winkel:

Tab. 6.1

| Atomkette | d[nm] | $\psi_c$ |
|---|---|---|
| Ni [1$\bar{1}$o] | o.25o | 3.25° |
| Ni [oo1] | o.354 | 2.73° |
| Ni [1$\bar{1}$2] | o.433 | 2.47° |
| 1/3 Ml O [1$\bar{1}$o] | o.75o | 1.oo° |
| 1/3 Ml O [oo1] | o.354 | o.84° |
| 1/3 Ml O [1$\bar{1}$2] | 1.3oo | o.76° |

Für die Sauerstoff-Atomketten wurden Abstände d angenommen, die dem 3-fachen Abstand der Substrat-Atome in der jeweiligen Richtung entspricht. Dieser Abstand stellt sich bei einer Bedeckung von 1/3 Monolage ein.

Werden die Ionen mit verschiedenen Stoßparametern auf die Atomkette eingeschossen, so entsteht hinter der Kette ein Schattenbereich, in dem keine Ionenbahnen auftreten. Dies ist in Abb. 6.1 dargestellt. Diese Bahnen sind das Ergebnis einer Computer-Simulation, bei der 2oo keV-$He^+$-Ionen unter $\phi = 1^o$ und $\theta = o^o$ auf eine einzelne, starre [1$\bar{1}$o]-Ni-Kette (d = o.25 nm) geschossen wurden. Die Bahnen sind auf eine Ebene senkrecht zur Kette projiziert. Am Rand des Schattenbereichs ist die Flußdichte gegenüber der einfallenden Flußdichte erhöht. Der Kreis in Abb. 6.1 bezeichnet den Ort, wo sich im Kristall die [1$\bar{1}$o]-Kette der 2. Atomebene befindet. Bei den angegebenen Einschußwinkeln liegt diese Atomkette gerade im Bereich der erhöhten Flußdichte. Die Ionen werden also unter diesen Bedingungen von den Ketten der ersten Atomebene auf die Ketten der zweiten Atomebene fokussiert. Diese Fokussierung führt zu einer erhöhten Streuausbeute, die in Abs. 6.2 diskutiert wird.

Die Bahn des He-Ions, das ohne seitliche Versetzung auf die [1$\bar{1}$o]-Kette der 2. Atomebene einfällt (also mit Stoßparameter Null, komplanar mit dieser Kette), ist in Abb. 6.2 für die zwei Projektil-Energien 2oo keV und 75 keV dargestellt. Die Längeneinheit in Richtung der Kette ist verkürzt. Der Einschußwinkel $\phi$ zur Kette ist $1^o$ bzw. $1.63^o$. Damit ist die Querenergie

$$E_\perp = E \cdot \sin^2\psi \qquad (6.2)$$

in beiden Fällen gleich 61 eV. Der Abstand der nächsten Annäherung an die Kette ist daher mit o.o65 nm ebenfalls gleich. Wegen $\psi < \psi_c$ ($\psi_c = 3.25^o$ bei 2oo keV bzw. $5.31^o$ bei 75 keV nach Gl. 6.1) ist der Einfallswinkel gleich dem Ein-

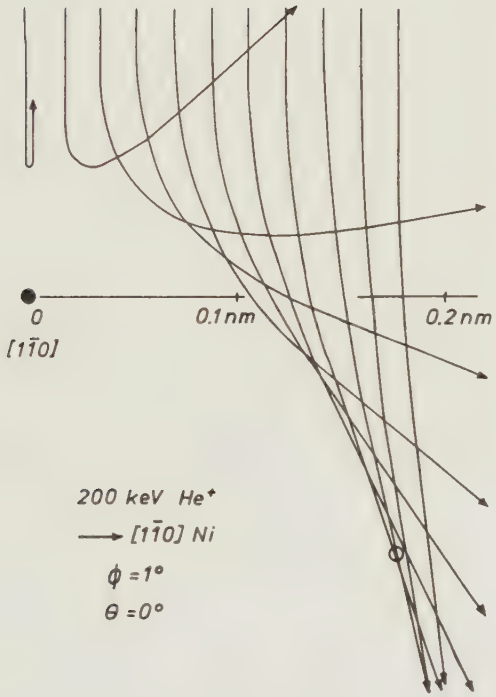



Abb. 6.1 : Bahnen von He - Projektilen, die an einer [1$\bar{1}$0] - Ni - Atomkette gestreut werden ( Projektion in Z - Richtung )

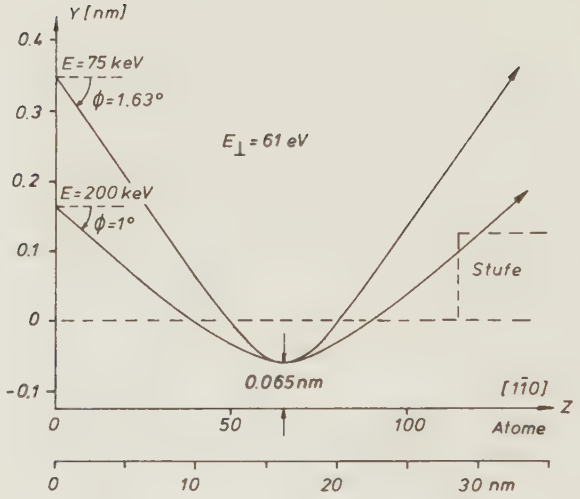



Abb. 6.2 : Bahnen zweier He - Projektile, die von einer $[1\bar{1}0]$ - Ni - Atomkette gestreut werden

( Z - Achse verkürzt dargestellt )

fallswinkel. Für diese Reflexion kann man eine Entkomm-Länge definieren als die Entfernung zwischen dem binären Stoß bei der größten Annäherung an die Kette und dem Stoß, bei dem das Ion o.125 nm Höhe über der Oberfläche erreicht hat. In dieser Höhe befinden sich bei einer realen Kristalloberfläche die Atome von Aufwärtsstufen. Die Entkomm-Länge ist umgekehrt proportional zu $\phi$ und beträgt 55 Atomabstände für das 2oo keV-Ion bzw. 25 Atomabstände für das 75 keV-Ion. Für das letztere ist deshalb die Wahrscheinlichkeit einer Begegnung mit einer Stufe vermindert.

In der gleichen Weise wie für die Ni-Atomkette in Abb. 6.1 wurden die Bahnen von 2oo keV-He-Ionen berechnet, die unter dem senkrechten Einfallswinkel $\phi = 1^{o}$ und unter den seitlichen Einfallswinkel $\Theta = o^{o}$, $o.5^{o}$ bzw. $1^{o}$ auf eine einzelne Sauerstoffkette des einfachen Atomabstands in [oo1]-Richtung (o.354 nm) eingeschossen werden. In Abb. 6.3 sind die Grenzen der entstehenden Schattenbereiche, an denen die Überhöhung der Flußdichte auftritt, für diese Einfallswinkel eingezeichnet. Die Lage der Oberfläche ist gestrichelt und die [oo1]-Ni-Atomketten sind als Kreise dargestellt. Entsprechend den Ergebnissen von Abs. 7 wurden die Sauerstoffatome in einer Höhe von o.125 nm zwischen den Ni-Atomketten, also in der kurzen Brückenposition, angenommen. Die Symmetrieachse des Schattenbereichs wird durch den Einschußwinkel $\Theta$ bestimmt. Bei $\Theta = 0^{o}$ trifft der Rand des Schattenbereichs mit seiner erhöhten Flußdichte gerade auf die Ketten der ersten Atomebene des Substrats. Die dadurch gegenüber den Einschußwinkeln $\Theta = o.5^{o}$ bzw. $1^{o}$ erhöhte Reflektivität wird in Abs. 7 zur Positionsbestimmung benützt. Mit wachsendem Winkel $\Theta$ erhöht sich die Querenergie $E_{\perp} = E \cdot \sin^2\psi$ ($\psi^2 \approx \phi^2 + \Theta^2$) der einfallenden Ionen zur Atomkette. Dadurch nähern sich die Ionenbahnen der Kette. Der Schattenbereich wird schmaler. Wird $\psi \approx \psi_c = 1.46^{o}$ (Gl. 6.1 mit d = o.354 nm), dann nähern sich diejenigen

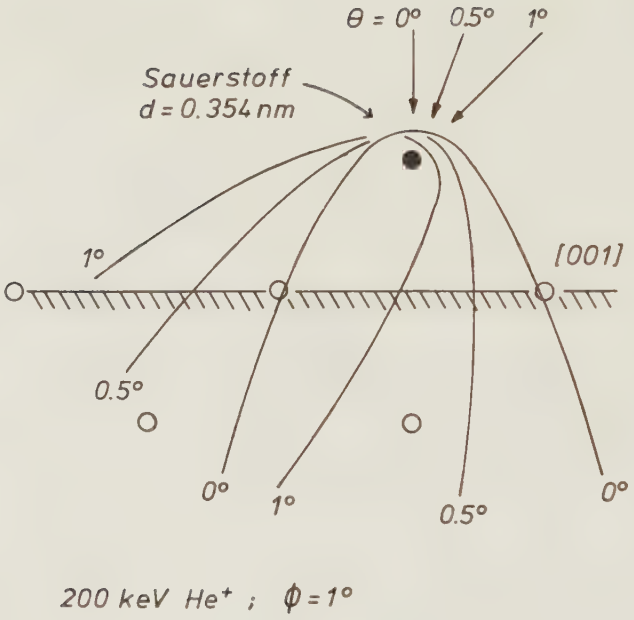



Abb. 6.3 : Schattenbereichsgrenzen von He - Projektilen, die bei drei verschiedenen Einschußwinkeln Θ an einer Sauerstoff - Atomkette gestreut werden ( Projektion in Z - Richtung )

Projektile mit kleinen Stoßparametern der Kette auf so kleine Entfernungen, daß das Streupotential in Richtung der Kette Welligkeiten aufweist. Diese wird von den einzelnen Atomen der Kette verursacht. Dadurch ist die Flußdichteüberhöhung am Rand des Schattenbereichs weniger stark ausgeprägt. Die Simulationen ergaben, daß für

$$\psi \gtrsim 1.5 \cdot \psi_c \tag{6.3}$$

die Ionen die Kette durchdringen können. Für diese Winkel existiert kein Schattenbereich mehr. Es bleiben nur die schmalen Schattenkonusse der einzelnen Atome der Kette übrig. Der Bereich für den seitlichen Einfallswinkel $\theta$, für den hinter einer Sauerstoff-Atomkette ein Schattenbereich auftritt, ist mit Gl. 6.3:

$$|\theta| \lesssim \sqrt{(1.5\ \psi_c)^2 - \phi^2}$$

Für $\phi = 1^o$ ergibt sich bei einer Bedeckung von 1/3 Monolage mit den Werten $\psi_c$ nach Gl. 6.1 für die Einschußrichtungen:

Tab. 6.2

| Einschußrichtung | $\lvert\theta\rvert \lesssim$ |
|---|---|
| $[1\bar{1}0]$ | $1.12^o$ |
| [001] | $0.77^o$ |
| $[1\bar{1}2]$ | $0.55^o$ |

Für diese Bereiche kann erwartet werden, daß sich die Anzahl der gestreuten Ionen von der einer nicht mit Sauerstoff bedeckten Oberfläche unterscheidet.

## 6.2 FLUSSDICHTEVERTEILUNGEN

In den Abb. 6.4 - 6.9 werden Ergebnisse gezeigt von Computer-Simulationen für die Flußdichteverteilungen von 2oo keV-He-Projektilen, die unter einem senkrechten Einschußwinkel $\phi = 1^{o}$ auf eine starre (11o)-Ni-Oberfläche auftreffen. Die Atomketten sind in ihrer Projektion als schwarze Punkte gezeichnet. Die Flußdichten sind bezogen auf die Flußdichte der einfallenden Projektile.

Abb. 6.4 zeigt die Flußdichteverteilung bei seitlich parallelem Einschuß zur [1$\bar{1}$o]-Richtung ($\Theta = o^{o}$). Der Winkel $\psi = 1^{o}$, unter dem die Ionen zur Kette einfallen, ist kleiner als der kritische Winkel $\psi_c = 3.25^{o}$ für axiale Gitterführung (Tab. 6.1). Dadurch entstehen um die Ketten der obersten Atomlage die in Abs. 6.1 beschriebenen Schattenbereiche, an deren Grenzen die Flußdichte überhöht ist. Die Fokussierung der Ionenbahnen auf die Ketten der 2. Atomlage (Abb. 6.1) läßt in Abb. 6.4 über diesen Ketten eine 19-fache Flußdichteüberhöhung entstehen.

Nach Sizmann und Varelas (1o1) tritt zwischen den [1$\bar{1}$o]-Ketten der 1. und 2. Atomlage ein Potentialminimum von 31 eV für He-Projektile auf. Diese Schwelle könnte mit der hier zur Verfügung stehenden Querenergie $E_{\perp} = E \cdot \sin^2\psi =$ 61 eV überwunden werden. Die Ionen werden jedoch durch die Fokussierung an diesem Ort vorbeigeführt und dringen deshalb nicht ins Innere des Kristalls ein. In Bezug auf die Zahl der einfallenden Ionen ist der in den Nachweisbereich gestreute Teil R = 1.

Die Fokussierung durch axiale Gitterführung an zwei Atomreihen wurde durch Shulga theoretisch beschrieben (1o2). Dabei wird analytisch der Ablenkwinkel bei der Streuung an einer einzelnen Atomkette in der Impulsnäherung für verschiedene Potentiale berechnet. Für Ionen, die im Bereich

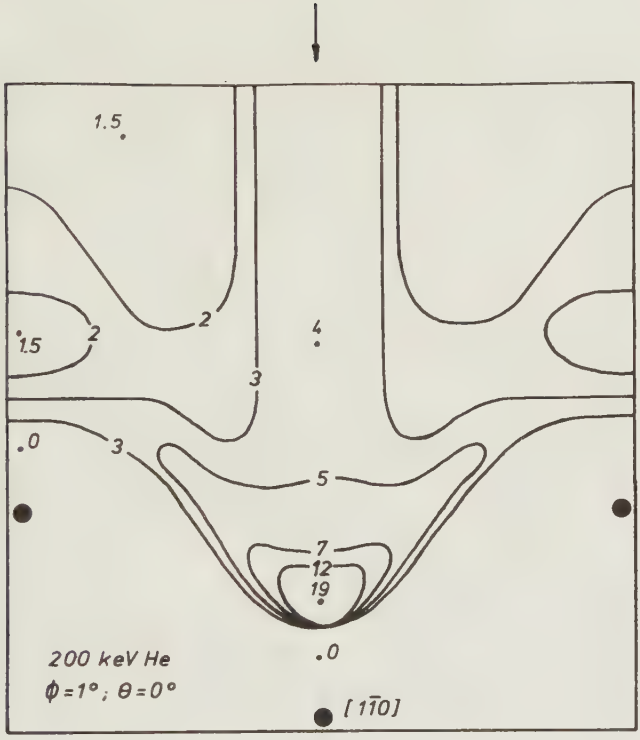



Abb. 6.4 : Flußdichteverteilung :
200 keV He → (110) Ni [1$\bar{1}$0]
$\Theta = 0^{\circ}$ ( der Pfeil gibt die Projektion der Einschußrichtung an )

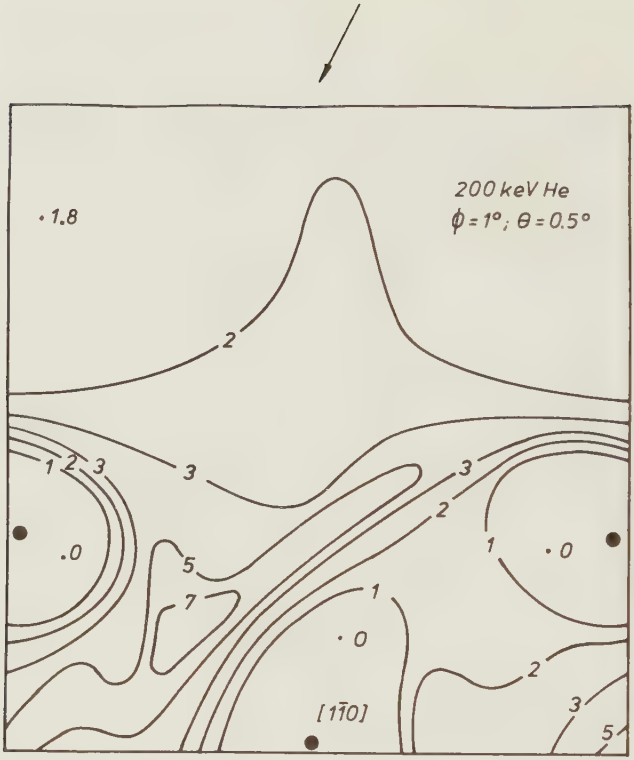



Abb. 6.5 : Flußdichteverteilung , $\Theta = 0.5^{\circ}$

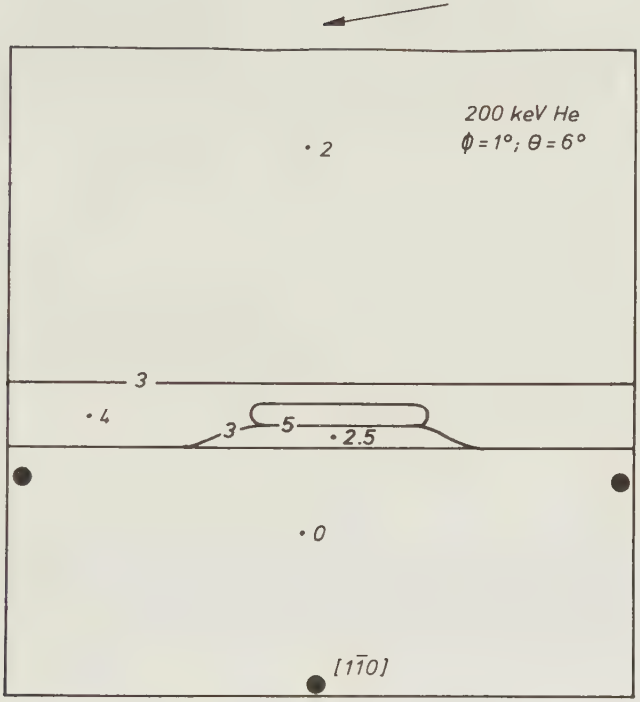



Abb. 6.6 : Flußdichteverteilung, $\Theta = 6^{\circ}$

um die Mitte zwischen zwei Atomketten einfallen, ist der Ablenkwinkel durch Streuung an beiden Ketten proportional zum Abstand des einfallenden Ions zu dieser Mitte. In Analogie zur optischen Sammellinse werden daher die Ionenbahnen in einer Brennweite f fokussiert, für die in der Thomas-Fermi-Molière-Näherung angegeben wird:

$$f^{-1} = \frac{2\pi \cdot Z_1 Z_2 e^2}{d \cdot E \cdot a_{TF}} \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \beta_i \exp\left[-\beta_i \frac{a}{a_{TF}}\right] \qquad (6.4)$$

Darin sind: $E_\perp \approx E\ (\theta^2 + \phi^2)$; d: Atomabstand in einer Kette; a: halber Abstand der beiden Ketten. Für die Streuung an den $[1\bar{1}0]$-Ketten von Abb. 6.4 ergibt sich mit d = o.25 nm, a = o.177 nm und Gl. 5.13 und 5.14 :

$$f_{[1\bar{1}0]} = \text{o.171 nm}$$

Der Brennpunkt liegt also unterhalb der Kette der zweiten Atomebene (Abstand der Atomebenen: o.125 nm). Für die $[1\bar{1}2]$-Einschußrichtung (vergl. Abb. 6.7) ist mit d = o.433 nm und a = o.1o2 nm:

$$f_{[1\bar{1}2]} = \text{o.o6o8 nm}$$

Bei seitlichem Einschuß ($\theta = o.5^o$) ändert sich die Orientierung der Schattenbereiche der obersten Atomketten (Abb. 6.5). In diesem Fall können die Ionen ins Innere des Kristalls eindringen. Die Grenzen der Schattenbereiche überschneiden sich etwa am Ort des Potentialminimums und führen dort zu einer 7-fachen Flußdichteüberhöhung. Der Reflexionskoeffizient R sinkt auf R = o.73, da ein Teil der Projektile im Inneren des Kristalls steckenbleibt und ein anderer Teil die Oberfläche mit $\phi_{aus} > 1o^o$ verläßt, also nicht als nachgewiesen gewertet wird.

Bei einer Vergrößerung des seitlichen Einfallswinkels $\Theta$ auf einen kritischen Wert $\Theta_{ap}$ tritt ein Übergang von axialer zu planarer Gitterführung an der Oberfläche auf, da der senkrechte Einfallswinkel $\phi = 1^{\circ}$ kleiner ist als der kritische Winkel für planare Gitterführung $\phi_c = 1.16^{\circ}$ an einer (11o)-Ni-Ebene (66,98). Für den Fall der Gitterführung im Volumen wurde dieser Übergang von Bill et al.(1o3) untersucht. Diese Ergebnisse können nach Varelas (1o4) auf die Oberfläche übertragen werden, wenn berücksichtigt wird, daß das Projektil bei der planaren Gitterführung an der Oberfläche nur am Potential einer einzigen Ebene gestreut wird. Dann ergibt sich der kleinste Winkel $\Theta_{ap}$, bei dem planare Gitterführung auftritt, aus:

$$\Theta_{ap} = \left[ \frac{\pi}{4} \frac{a}{a_{TF}} \frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{E \cdot d} \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \beta_i \exp\left(-\beta_i y_{min}/a_{TF}\right) \right]^{1/2}$$

Dabei gelten die Bezeichnungen von Gl. 6.4. $y_{min}$ ist der kleinste Abstand von der Oberfläche, den das Projektil bei der planaren Gitterführung für $\phi = 1^{\circ}$ und $\Theta$: random erreichen kann. Aus Computer-Simulationen wurde $y_{min} = o.o27$ nm erhalten. Damit ist

$$\Theta_{ap} = 3.64^{\circ}$$

Für $\Theta \geq \Theta_{ap}$ werden die Projektile unter Erhaltung ihrer Querenergie zur Oberfläche spiegelnd reflektiert.

Für den seitlichen Einschußwinkel $\Theta = 6^{\circ}$ ist die Flußdichteteilung in Abb. 6.6 dargestellt. Alle Ionen werden spiegelnd an der Oberfläche reflektiert (R = 1). Die erhöhte Flußdichte direkt über der Oberfläche wird durch die verlängerte Aufenthaltsdauer in diesem Bereich während der Umkehr des Projektils verursacht. Eine Modulation der Flußdichte durch die Atomketten ist noch zu erkennen, die erst für größere Winkel $\Theta$ verschwindet.

Abb. 6.7 zeigt die berechnete Flußdichteverteilung bei parallelem Einschuß ($\Theta = o^{o}$) zu den[$1\bar{1}2$]-Atomketten für $\phi = 1^{o}$. Es tritt axiale Gitterführung auf, da der Einfallswinkel zu den Ketten kleiner ist als der kritische Winkel $\psi_c = 2.47^{o}$ (Tab. 6.1). Die Schattenbereiche der ersten Atomlage überschneiden sich etwa o.o1 nm unter der Oberfläche mit 13-facher Flußdichteüberhöhung. Die nach Shulga, Gl. 6.4, berechnete Brennweite f = o.o61 nm liegt wegen der dort verwendeten Impulsnäherung tiefer. Im Gegensatz zur [$1\bar{1}$o]-Richtung befindet sich an dieser Stelle keine weitere Atomkette. Daher führt die Fokussierung bei der [$1\bar{1}2$]-Richtung nicht zu einer erhöhten Reflektivität bei parallelem Einschuß zu den Ketten. Die fokussierten Projektile dringen ungehindert ins Innere des Kristalls ein. Der Bruchteil R = o.61 der einfallenden Ionen wird in den Nachweisbereich ($\phi_{aus} \leq 1o^{o}$) gestreut. Der Rest bleibt überwiegend im Inneren des Kristalls stecken.

Zur Demonstration des Einflusses von adsorbierten Atomen auf die Flußdichteverteilung wurde für die [$1\bar{1}2$]-Einschußrichtung die Streuung an Sauerstoffatomen mitsimuliert. Die Sauerstoffatome haben untereinander denselben Abstand wie die Nickelatome (o.433 nm). Dies entspricht einer Bedeckung von 1 Monolage. Die Höhe ist o.125 nm, entsprechend dem Ergebnis der Positionsbestimmung in Abs. 7. Die seitliche Lage wurde zwischen bzw. über den Ketten angenommen. Dies entspricht den beiden Brückenpositionen (vergl. Abb.7.1). Die Ergebnisse sind in Abb. 6.8 bzw. 6.9 dargestellt. Da der Einfallswinkel $\psi = 1^{o}$ kleiner ist als der kritische Winkel $\psi_c = 1.32^{o}$ für diese Sauerstoffketten (Gl. 6.1), tritt korrelierte Streuung an diesen Ketten auf. Es bilden sich jeweils Schattenbereiche um die Sauerstoffketten, deren Ränder durch die erhöhte Flußdichte erkennbar sind. Diese Bereiche sind wegen der kleineren Kernladungszahl von Sauerstoff schmaler als die Schattenbereiche der Nickelketten

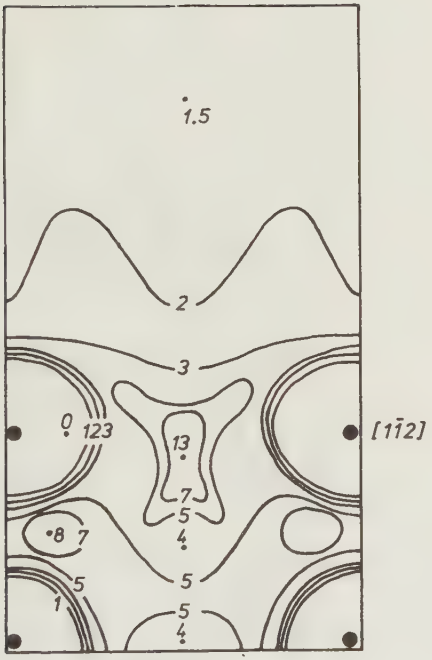



Abb. 6.7 : Flußdichteverteilung :
200 keV He ⟶ (110) Ni [1$\bar{1}$2]
ohne Sauerstoff

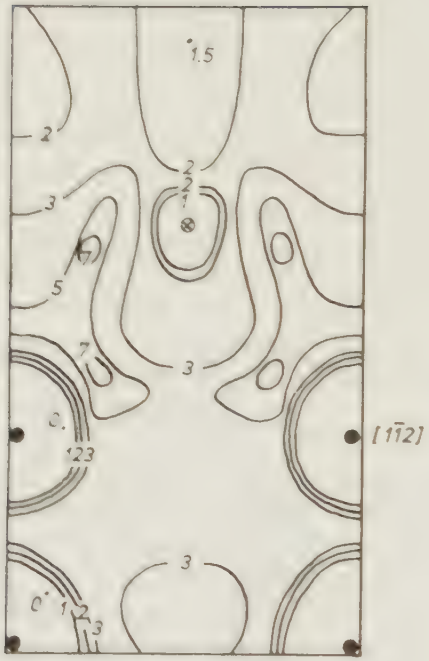



Abb. 6.8 : Flußdichteverteilung :
200 keV He ⟶ (110) Ni [1$\bar{1}$2]
1 Ml Sauerstoff ⊗ , zwischen den Ni - Ketten

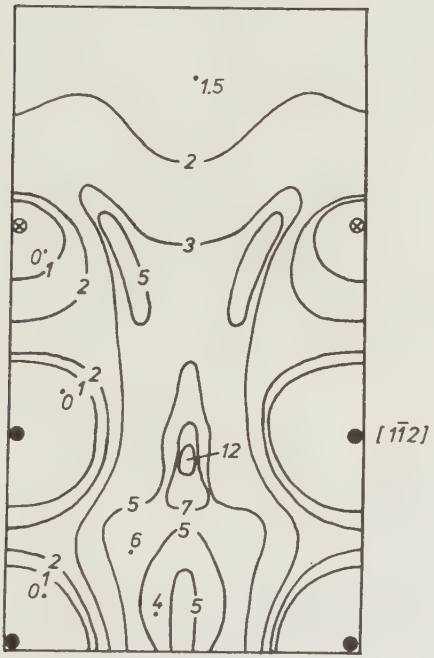



Abb. 6.9 : Flußdichteverteilung,
1 Ml Sauerstoff ⊗ , über den Ni - Ketten

in Abb. 6.4. Die Flußdichteverteilungen zwischen den Ni-Atomketten werden nach Abb. 6.8 und 6.9 wesentlich bestimmt durch die Streuung an der Sauerstoffkette. In Abb. 6.8 werden die Ionen gerade auf die Nickel-Atomketten gelenkt. Dadurch steigt der Bruchteil R der reflektierten Teilchen auf o.85 gegenüber o.61 bei der Sauerstoff-freien Oberfläche (Abb. 6.7) an. Dagegen lenken die Sauerstoffketten in Abb. 6.9 die Ionen ins Innere des Kristalls. Sie werden in Höhe der 2. Atomlage mit einer 12-fachen Flußdichteüberhöhung fokussiert. Der Bruchteil R der reflektierten Teilchen sinkt auf o.56. Die Anzahl der reflektierten Teilchen wird also durch die seitliche Lage der Sauerstoffatome beeinflußt. Dadurch kann deren Position bestimmt werden (Abs. 7). Im Experiment wird eine Position nach Abb. 6.8 gefunden.

## 6.3 EINFLUSS VON OBERFLÄCHEN-STUFEN AUF DIE AXIALE GITTERFÜHRUNG

Bei streifendem Einfall kann die Anzahl der gestreuten Teilchen durch Aufwärts-Stufen reduziert werden. Solche Stufen existieren auf der elektropolierten Oberfläche in den geneigten Teilen der Orangenhaut-Welligkeit (Abs. 3.1). Bei $\phi = 1^{\circ}$ treffen die einfallenden Ionen dabei überwiegend auf die in Bezug auf den einfallenden Strahl aufwärts geneigten Teile dieser Welligkeit, in geringerem Maß auf die abwärts geneigten Teile. Bei Spiegelreflexion an der Oberfläche ($\phi = 1^{\circ}$, $\theta > 3.5^{\circ}$) können die Ionen unter diejenige Ebene parallel zur Oberfläche eindringen, die an einer Aufwärtsstufe beginnt. Für den Einfall parallel zur [1$\bar{1}$0]-Atomkette in der Oberfläche ($\theta = 0^{\circ}$) ist die Wirkung einer Aufwärtsstufe in Abb. 6.1o skizziert. Wie in Bezug auf Abb. 6.4 diskutiert wurde, werden die Projektile von den Atomreihen 1 der Oberfläche auf die Atomreihe 2 der zweiten Ebene fokussiert, von wo aus die Teilchen hauptsächlich in

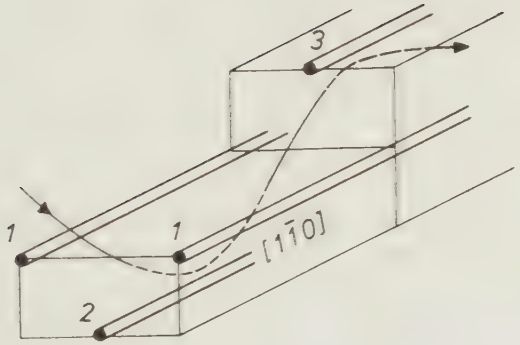



Abb. 6.10 : Wirkung einer Aufwärts - Stufe auf die axiale Oberflächen - Gitterführung

der Projektion senkrecht zur Oberfläche reflektiert werden. Auf ihrem Weg treffen sie auf die Atomreihe 3 der Aufwärts-Stufe, von der sie zurück ins Innere des Kristalls reflektiert werden. Für diese Ionen verschwindet die erhöhte Reflektivität durch Fokussierung.

Dies wird durch die folgenden Computer-Simulationen gezeigt, in denen die $He^+$-468.6 nm-Lichtausbeute I der gestreuten Ionen als Funktion des seitlichen Einschußwinkels $\Theta$ für Oberflächen mit und ohne Aufwärts-Stufen berechnet wurde. Die Ergebnisse für $\phi = 1^o$ und E = 2oo keV sind in Abb. 6.11 dargestellt. Entsprechend wurden diese Rechnungen auch für $\phi = 1.63^o$ und E = 75 keV durchgeführt. Dies wird im Zusammenhang mit Abb. 6.14 diskutiert. In allen Rechnungen wurden Gitterschwingungen für T = 45o K berücksichtigt. Der Stufenabstand s (Terrassenbreite) ist in Einheiten des Atomabstands in $[1\bar{1}o]$-Richtung (o.25 nm) angegeben. Die relative Lichtausbeute 1 wird erreicht, wenn alle einfallenden Ionen (bei diesen Simulationen: 4oo pro $\Theta$-Wert) mit maximaler Lichtanregungswahrscheinlichkeit (d.h. ohne Energieverlust, vergl. Abs. 5.8) in den Nachweisbereich ($\phi_{aus} \leq 1o^o$) gestreut werden.

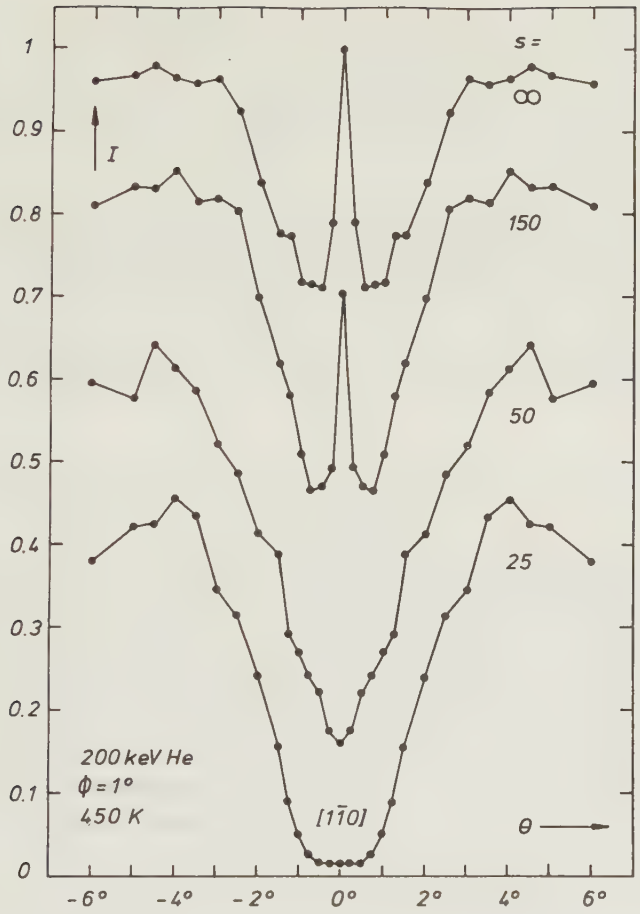



Abb. 6.11 : Computer - Simulation des Einflusses von Aufwärts - Stufen ( Abstand s, Einheit 0.25 nm ) auf die $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute I bei axialer Oberflächen - Gitterführung

Bei der stufenfreien Oberfläche (Stufenabstand $s = \infty$) tritt das Fokussierungs-Maximum bei $\Theta = o^{\circ}$ auf. Bei random-Einfall ($|\Theta| > 3.5^{\circ}$) wird die Intensität 1 nicht erreicht, da etwa 4 % der Ionen durch Stöße mit thermisch ausgelenkten Targetatomen für den Nachweis verloren gehen. Im Bereich $o.5 \leq |\Theta| \leq 3^{\circ}$ können die Ionen zwischen die $[1\bar{1}o]$-Atomketten der Oberfläche ins Innere des Kristalls eindringen. Dadurch sinkt die Anzahl der gestreuten Ionen und damit die Lichtintensität (vergl. Flußdichteverteilung Abb. 6.4).

Bei abnehmendem Stufenabstand ändern sich zwei Merkmale der $I_{(\Theta)}$-Kurven:

1. Bei random-Einfall ($|\Theta| > 3.5^{\circ}$) nimmt die Lichtausbeute ab, da mehr Teilchen von den Stufen eingefangen werden und an der Reflexion an der Oberfläche gehindert werden.
2. Bei $\Theta = o^{\circ}$ verschwindet das Fokussierungs-Maximum, sobald die Terrassenbreite s kleiner als die Länge ist, die das Projektil benötigt, um nach der Reflexion an den Atomketten der zweiten Ebene die Oberfläche verlassen zu können (vergl. Abb. 6.1o). Dies geschieht unter diesen Einschußbedingungen bei Terrassenbreiten kleiner als 1oo Atomabstände.

Bei einer Terrassenbreite von 25 Atomabständen entsteht ein tiefes Minimum mit einem Rückgang der Ausbeute auf 4 % des random-Werts, der vergleichbar ist mit Ergebnissen von Experimenten zur axialen Gitterführung im Volumen.

Der Grund dafür, daß die bei $\Theta = o^{\circ}$ fokussierten Ionen stärker von den Stufen beeinfluß werden als die Ionen, die bei $\Theta = 6^{\circ}$ an der obersten Atomebene reflektiert werden, ist, daß die Entkomm-Länge, die in Abs. 6.1 definiert wurde, für die fokussierten Ionen etwa zweimal so groß ist wie für die Ionen, die an der obersten Atomebene reflektiert wurden.

Die Wirkung von anderen möglichen Anordnungen von Stufen ist ebenfalls durch Computer-Simulationen geprüft worden. Eine Aufeinanderfolge von Abwärts-Stufen ergibt eine größere Streu- und Lichtausbeute bei allen seitlichen Einschußwinkeln $\Theta$, verglichen mit der ungestuften Oberfläche. Das Maximum der Fokussierung bei $\Theta = o^{\circ}$ wird wenig beeinflußt, die Lage des Minimums verschiebt sich jedoch zu größeren Winkeln. Die Ergebnisse für Stufenabstände $s = 5o$ bis $\infty$ sind in Abb. 6.12 dargestellt. Die Lichtausbeute für die ungestufte Oberfläche ($s = \infty$) liegen über den Werten der entsprechenden Rechnung in Abb. 6.11. Dies liegt lediglich an der unterschiedlichen Weise, wie die ausgetretenen Teilchen mit Lichtanregungswahrscheinlichkeiten gewichtet werden: Diese Werte wurden in Abb. 6.11 über ein Raster und in Abb. 6.12 kontinuierlich aus der Austrittsgeschwindigkeit berechnet.

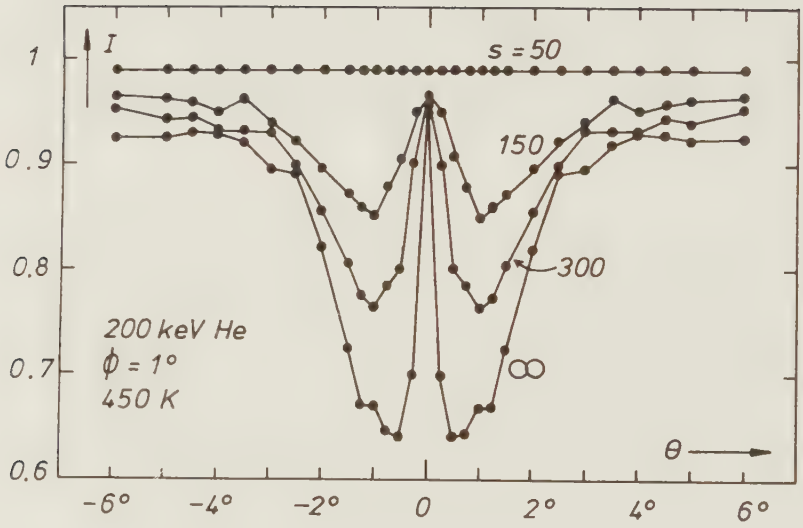



Abb. 6.12 : Computer - Simulation des Einflusses von Abwärts - Stufen ( Abstand s , Einheit 0.25 nm ) auf die $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute bei axialer Oberflächen - Gitterführung

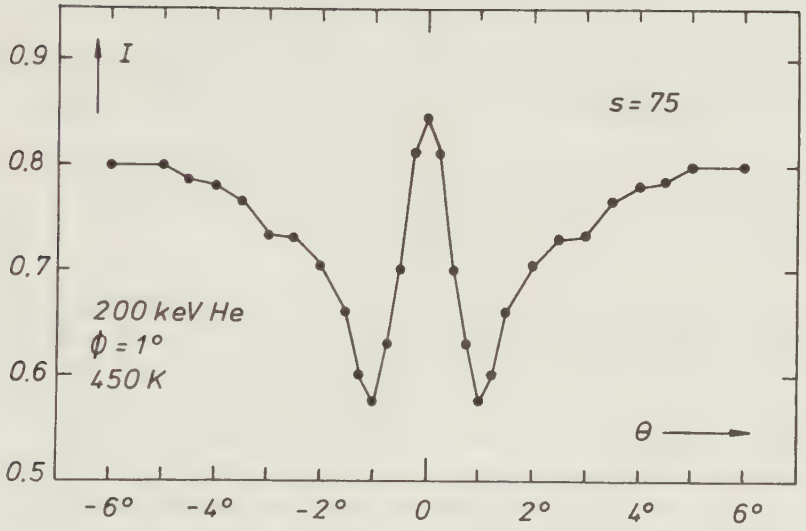



Abb. 6.13 : Computer - Simulation des Einflusses einer abwechselnden Folge von Aufwärts - und Abwärts - Stufen ( Abstand s, Einheit 0.25 nm ) auf die $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute bei axialer Oberflächen - Gitterführung

Eine abwechselnde Folge von Aufwärts- und Abwärtsstufen unterdrückt das Fokussierungs-Maximum ebenfalls nicht, sie verbreitert es vielmehr, wie Abb. 6.13 am Beispiel s = 75 zeigt. Die Reflektivität bei random-Einschuß sinkt jedoch durch die Wirkung der Aufwärtsstufen ebenso, als wären nur diese vorhanden. Bei einem kleineren Stufenabstand als s = 25 sinkt auch die random-Ausbeute nicht weiter, da die Aufwärtsstufen durch die Abwärtsstufen abgeschattet werden.

Sowohl die Abwärtsstufen-Folge als auch die alternierende Stufenfolge zeigen eine Verbreiterung des Maximums, die der experimentell gefundenen nahekommt.

In Abb. 6.14a werden experimentelle $He^+$-Lichtausbeuten für zwei Einschußbedingungen gezeigt: E = 2oo keV, $\phi = 1^\circ$ und E = 75 keV, $\phi = 1.63^\circ$. Bei diesen Bedingungen ist die Transversalenergie $E_\perp = E \cdot \phi^2 = 61$ eV in beiden Experimenten gleich. Die Ergebnisse wurden auf den random-Wert normiert. Für E = 2oo keV ergibt sich ein Minimum in der Lichtausbeute, während für E = 75 keV das Fokussierungsmaximum bei $\theta = o^\circ$ erscheint.

Die besten Anpassungen von Computer-Simulationen an diese Experimente wurden jeweils unabhängig für denselben Abstand von Aufwärtsstufen von 75 Atomabständen in der [1$\bar{1}$o]-Richtung erhalten (Abb. 6.14b). Dieser Stufenabstand ist klein genug, um das Fokussierungsmaximum bei $\phi = 1^\circ$ (2oo keV) zu unterdrücken, aber noch groß genug, daß die fokussierten

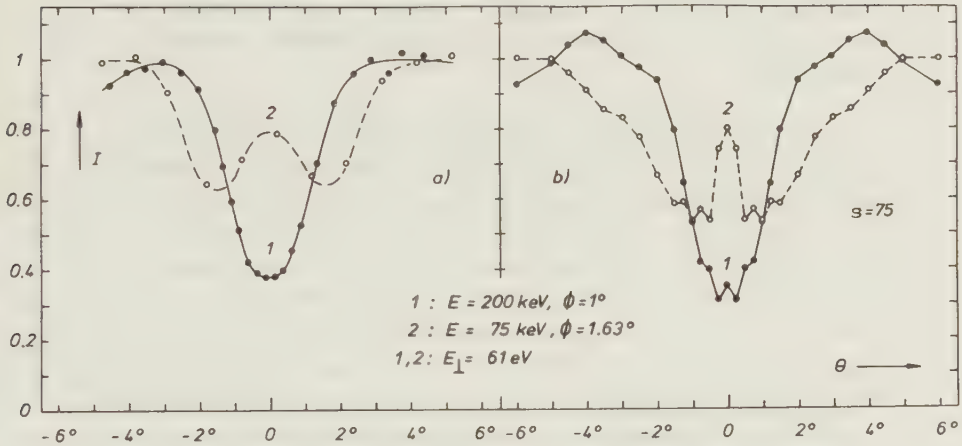



Abb. 6.14 : $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute bei axialer Oberflächen - Gitterführung für zwei verschiedene Einschußbedingungen bei gleicher Querenergie $E_\perp$ :

a) Experiment,

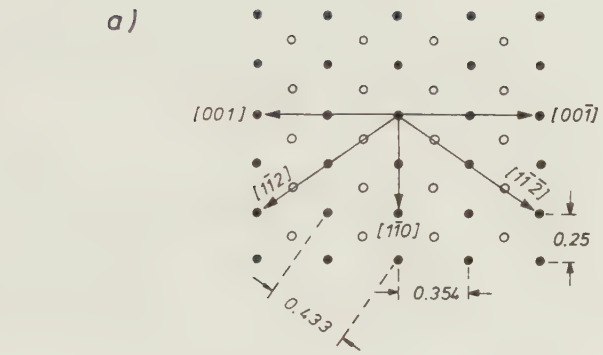
b) Computer - Simulation mit Aufwärts - Stufenabstand s = 75 · 0.25 nm.

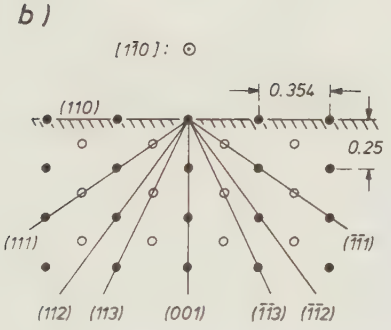
und reflektierten Ionen bei $\phi = 1.63^{\circ}$ (75 keV) nicht von der Stufe eingefangen werden. Für letztere ist die Entkomm-Länge nach Abs. 6.1 um den Faktor $1^{\circ}/1.63^{\circ}$ kleiner. Das Fokussierungsmaximum bei 75 keV ist im Experiment breiter als in der Computer-Simulation, was möglicherweise auf den Einfluß eines Anteils an Abwärtsstufen zurückzuführen ist.

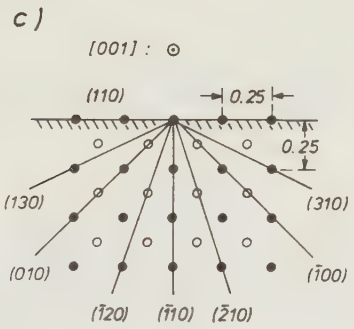
Die lokale geometrische Oberfläche, die aus einer Folge von Aufwärtsstufen des in Abb. 6.14 ermittelten Abstands von 75 Atomabständen besteht, ist um $o.4^{\circ}$ zur (11o)-Gitterebene und damit zur Oberfläche des Kristalls geneigt. Durch die Reflexion eines Laserstrahls wurde ein mittlerer Wert für die Oberflächenrauhigkeit von $o.14^{\circ}$ erhalten (Abs. 3.1). Der Unterschied zwischen beiden Werten ist darauf zurückzuführen, daß diejenigen Komponenten der Oberflächenrauhigkeit, die die Ionenstreuung am meisten beeinflussen, offenbar von der optischen Methode nicht vollständig aufgelöst und daher gemittelt werden.

## 6.4 PLANARE GITTERFÜHRUNG

Bei senkrechten Einschußwinkeln $\phi > 1^{\circ}$ kann neben der axialen auch planare Gitterführung durch niedrig indizierte Gitterebenen auftreten. Von jeder niedrig indizierten Atomkette in der Oberfläche (Abb. 6.15a) läuft ein Büschel ebenfalls niedrig indizierter Ebenen aus (Abb. 6.15 b-d). Bei streifendem Einfall ist daher ein paralleler Einschuß zu diesen Ebenen durch kleine Veränderungen des seitlichen Winkels $\Theta$ in der Größenordnung des senkrechten Winkels $\phi$ möglich.



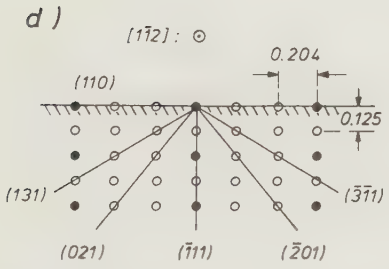



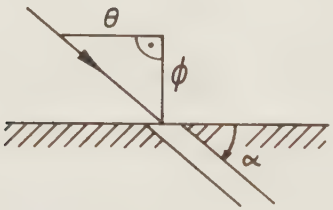

Abb. 6.15 :
a) niedrig indizierte Richtungen in der (110) - Oberfläche
b - d : niedrig indizierte Ebenen, ausgehend von den Richtungen in der Oberfläche :
b) [1$\bar{1}$0]
c) [001]
d) [1$\bar{1}$2]

Bedingungen für das Auftreten der planaren Gitterführung sind von Varelas und Sizmann (1o) angegeben und mit experimentellen Daten verglichen worden: Der Einschußwinkel zu den Ebenen muß kleiner sein als ein kritischer Winkel $\Theta_c$. Gleichzeitig muß der Winkel zu der niedrig indizierten Atomkette größer sein als ein Winkel $\phi_{min}$.

Bei planar geführten Projektilen ist die Wahrscheinlichkeit geringer, durch einen Stoß mit genügend großem Ablenkwinkel den Kristall wieder zu verlassen, als bei Projektilen, die in beliebiger Richtung einfallen. Falls die oben erwähnten Bedingungen erfüllt sind, ergibt sich daher ein Minimum in der Streuausbeute, wenn

$$\Theta = \phi/\tan\alpha \qquad (6.5)$$

wobei $\alpha$ der Winkel zwischen der Oberfläche und der jeweiligen niedrig indizierten Ebene des Büschels ist:




Als Beispiel für die Experimente zur planaren Gitterführung ist in Abb. 6.16 die $He^+$-Lichtausbeute bei Einschuß in das Ebenenbüschel, das von der [1$\bar{1}$o]-Richtung in der Oberfläche ausgeht (Abb. 6.15b) gezeigt. Die Pfeile kennzeichnen die Winkel $\Theta$, bei denen nach Gl: 6.5 mit $\phi = 5.7^o$ die Ionen parallel zu den jeweiligen Ebenen einfallen.

In der Computer-Simulation dieser Experimente können Stufen vernachlässigt werden. Diese Stufen treten nur als Struktur

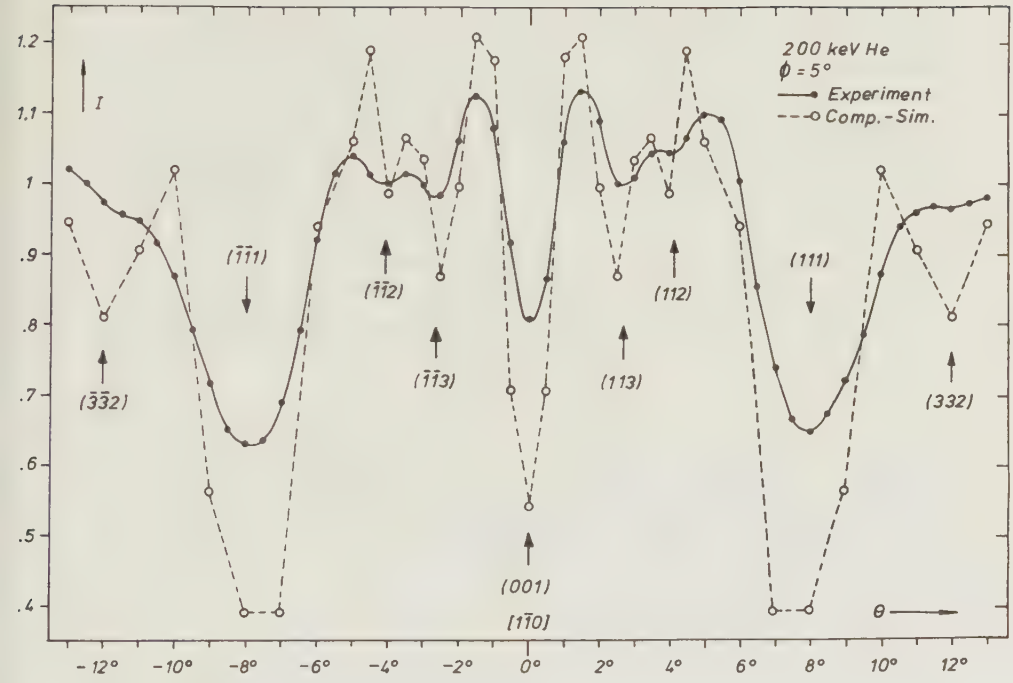



Abb. 6.16 : $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute bei planarer Gitterführung ; Einschuß in der Umgebung der $[1\bar{1}0]$ - Richtung ;
Computer - Simulation und Experiment

in der Schnittlinie der Ebenen mit der Oberfläche auf. Diese Struktur beeinflußt die Gitterführungsbedingungen nicht. Die Simulation (gestrichelt in Abb. 6.16) gibt Auftreten, Verlauf und Lage der Minima richtig wieder. Sie sind jedoch tiefer als im Experiment, besonders bei den schmalen Minima der (112)- und (113)-Ebenen. Als Ursache dafür kommt die Mosaik-Struktur des wirklichen Kristalls und die Strahldivergenz (Abs. 3.2) in Betracht. Dadurch wird über einen Bereich der Einfallswinkel gemittelt. Eine Abschätzung über die Verringerung der Tiefe des (oo1)-Minimums ergibt eine Halbwertsbreite von etwa o.5° für die Verteilung der Einfallswinkel. Auch können Versetzungen und Stapelfehler im Bereich unter der Oberfläche die Gitterführung unterbrechen, wodurch die Ausbeute im Minimum ansteigt (1o5).

Zur Untersuchung der Frage, ob die verringerte Tiefe der Minima im Experiment gegenüber der Computer-Simulation durch Winkelaufstreuung der Ionen durch Stöße mit Elektronen verursacht wird, wurde versuchsweise nach der Beziehung

$$\frac{d\overline{\vartheta^2}}{dZ} = \frac{m_e}{M_1} \cdot \frac{1}{E} \cdot \frac{dE}{dZ}$$

eine Winkelaufstreuung (59) in das Programm aufgenommen. Dabei ist dE/dZ der elektronische Energieverlust nach Abs.5.5 . Es ergab sich jedoch keine Änderung in der Tiefe der Minima bei planarer Gitterführung. Deshalb wurde die Winkelaufstreuung im weiteren nicht mehr berücksichtigt.

Das Ergebnis eines weiteren Experiments zur planaren Gitterführung ist in Abb. 6.17 gezeigt. Hier wurde der Strom der $He^+$-Ionen gemessen, die nach der Streuung durch die 2 mm-Öffnung des Faraday-Bechers hinter dem Kristall gelangen (Abb. 3.4). 2oo keV-He-Ionen wurden dazu unter $\phi = 5°$ in der seitlichen Umgebung der [oo1]-Richtung auf die (11o)-NiFe-Oberfläche eingeschossen. Diese Kurve wurde direkt

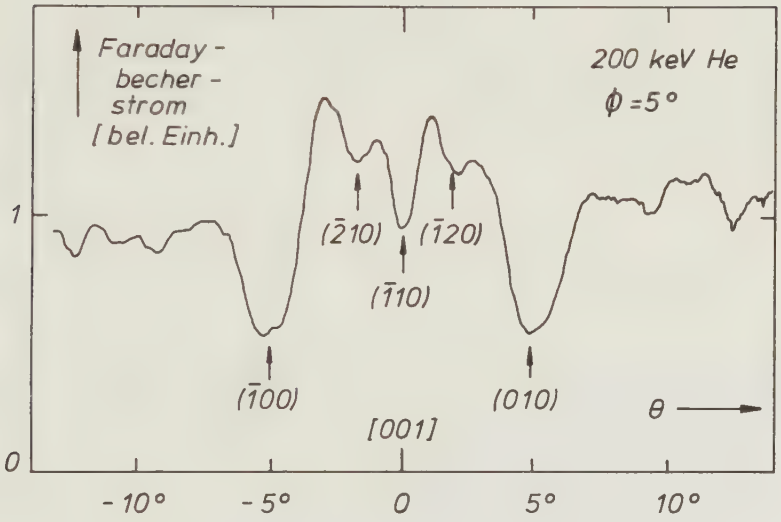



Abb. 6.17 : Strom der gestreuten $He^+$ - Ionen bei planarer Gitterführung ; Einschuß in der Umgebung der [001] - Richtung

von einem x-y-Schreiber, der an das Strommeßgerät angeschlossen war, in ca. 2 min aufgezeichnet. Eine Normierung auf die Strahlintensität durch das Flügelrad war wegen der konstanten Intensität während dieser Messung nicht notwendig. Es treten Minima in der Anzahl der gestreuten Ionen bei Einschuß parallel zu den niedrig indizierten Ebenen (Abb. 6.15c) auf. Durch diese Messung wird die Annahme bestätigt, daß auch die Minima in der Lichtausbeute bei planarer Gitterführung durch einen Verlust an gestreuten Teilchen verursacht wird.

## 6.5 PLANARE GITTERFÜHRUNG IN GEGENWART VON ADSORBIERTEM SAUERSTOFF

In Abb. 6.18a werden die Computer-Simulationen der Lichtausbeute des $He^+$-Übergangs bei planarer Gitterführung an den $(\bar{1}11)$-Ebenen, die von der $[1\bar{1}2]$-Richtung in der Oberfläche ausgehen (Abb. 6.15d), bei reiner und sauerstoffbedeckter Oberfläche verglichen.
Die Sauerstoffatome (1 Monolage) befinden sich dabei in o.125 nm Höhe und in einer Position in der Mitte zwischen den $(1\bar{1}1)$-Ebenen, wo eine größte Veränderung der Flußdichteverteilung und somit der Ausbeutekurve zu erwarten wäre. Die Rechnung zeigt einen Anstieg der Ausbeute im Minimum von o.27 auf o.32, der nicht außerhalb der Datenstreuung liegt. In Übereinstimmung mit der Computer-Simulation tritt im Experiment kein Rückgang der Tiefe des Minimums der Lichtausbeute bei Bedeckung der Oberfläche mit 1/3 Monolage Sauerstoff (Abb. 6.18b) ein. Die Ursache dieser geringen Empfindlichkeit der Streuausbeute für adsorbierte Atome wird im folgenden untersucht:

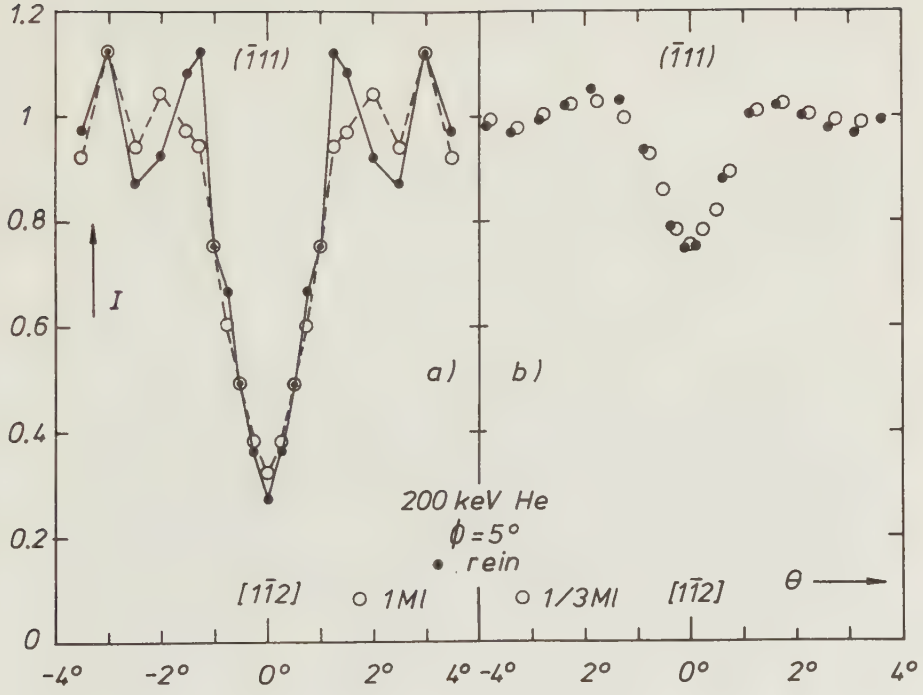



Abb. 6.18 : $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute bei planarer Gitterführung bei reiner bezw. Sauerstoff - bedeckter Oberfläche ;
a) Computer - Simulation
b) Experiment

Bei einer Sauerstoff-freien Oberfläche trifft ein Bruchteil $\chi$ der einfallenden Ionen mit einem Stoßparameter y zu den Ebenen auf die Oberfläche auf, der kleiner ist als ein kritischer Stoßparamete $y_c$. Teilchen mit $y < y_c$ werden wegen zu hoher Querenergie zu den Ebenen nicht planar geführt. Daher ist

$$\chi = 2\, y_c/d_p \qquad (6.6)$$

wobei $y_c \approx a_{TF}$ (98) und $d_p$ der Abstand der Ebenen ist. Für die $(1\bar{1}1)$-Ebenen ist $d_p$ = o.2o4 nm. Mit $a_{TF}$ = o.o142 nm (Gl. 5.14) ist

$$\chi = o.14 \qquad (6.7)$$

$\chi$ ist dann ein gutes Maß für die relative Ausbeute im Minimum, wenn die planar geführten Teilchen im Experiment kein Nachweissignal erzeugen (bei Nachweis z.B. durch Kernreaktion oder Rutherford-Rückstreuung mit Energieschwelle). Bei dem hier besprochenen Streuexperiment können jedoch auch Teilchen, die über weite Strecken der planaren Gitterführung unterliegen, nach einem Großwinkelstoß zurück zur Oberfläche gelangen und, wenn auch mit verminderter Wahrscheinlichkeit, nachgewiesen werden. Die Ausbeute im Minimum der Computer-Simulation in Abb. 6.18 ist daher mit $\chi$ = o.27 größer als der Wert nach Gl. 6.6.

Gl. 6.6 kann jedoch dazu dienen, um den Einfluß von adsorbiertem Sauerstoff auf die Streuausbeute im Minimum abzuschätzen:

Helium-Projektile, die an einem Sauerstoff-Atom in Richtung senkrecht zu den $(1\bar{1}1)$-Ebenen um mehr als den kritischen Winkel $\psi_c = 1.48^{\circ}$ (66,98) für planare Gitterführung an diesen Ebenen gestreut werden, tragen zusätzlich zur

Ausbeute im Minimum bei. Dazu müssen sie sich nach Abb. 5.3 dem Sauerstoffatom auf mindestens $r_c$ = 4 pm annähern. Der Bruchteil $\chi_{ox}$ der einfallenden Ionen, der durch die Sauerstoffatome eine Ablenkung $\vartheta > \psi_c$ erfährt, ist bei einem Einfallswinkel $\phi = 5^o$:

$$\chi_{ox} = \frac{\pi r_c^2}{d_p \cdot d \cdot \sin\phi} = 6.5 \cdot 10^{-3} \quad , \qquad (6.8)$$

wobei d = 0.433 nm der Abstand der Sauerstoffatome bei 1 Monolage ist. Mit Gl. 6.7 beträgt die relative Veränderung der Tiefe des Minimums durch Sauerstoff 5 %. Da ein Teil der Ionen bei dieser Streuung parallel zu den Ebenen abgelenkt wird, ist die wirkliche Veränderung noch kleiner. Die Streuausbeute kann bei diesen Gitterführungsbedingungen also praktisch nicht zur Positionsbestimmung der Sauerstoffatome benützt werden. Dementsprechend zeigen Experimente für den $He^+$-468.6 nm-Übergang keine Veränderung in der Tiefe des Minimums bei Sauerstoffbedeckung (Abb. 6.18b). Erst bei kleineren Einschußwinkeln $\phi$(1/sin$\phi$-Term in Gl.6.8), unter den Bedingungen der axialen Gitterführung durch die Sauerstoff-Atomketten, werden die Streuausbeuten genügend stark verändert, um Positionsbestimmungen zu ermöglichen.

Weitere Ergebnisse zur planaren Gitterführung werden in Abs. 6.6, 6.7, 8.2.8 und 8.3.2 besprochen.

## 6.6 EINFLUSS DER STOSSPARAMETER-ABHÄNGIGKEIT DES ENERGIEVERLUSTS

Der Einfluß der Abhängigkeit des Energieverlusts vom Stoßparameter auf die Streuausbeute wird an zwei Beispielen gezeigt: Für axiale Oberflächen-Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$o]-Richtung in Abb. 6.19 und für planare Gitterführung entlang den ($\bar{1}$11)-Ebenen, die von der[1$\bar{1}$2]-Richtung der Oberfläche auslaufen (vergl. Abb. 6.15d), in Abb. 6.2o. Die Ergebnisse der Computer-Simulationen mit Stoßparameterabhängigem Energieverlust nach Abs. 5.5.3 wurden durchgezogen dargestellt, die Ergebnisse der Rechnungen mit dem Stoßparameter-unabhängigen Energieverlust nach Abs. 5.5.1 gestrichelt. Es wurden jeweils 4oo Teilchen eingeschossen.

In Abb. 6.19 sind in den Kurven A die Zahl der (mit $\phi_{aus} \leq 1o^{o}$) gestreuten Projektile aller Austrittsenergien dargestellt. Der Verlauf der Kurven wurde in Abs. 6.2 diskutiert. Zwischen beiden Kurven besteht bis auf statistische Schwankungen kein Unterschied. Dies gilt auch für die kleinere Anzahl der Teilchen, die eine größere Strecke im Kristall zurückgelegt und damit einen größeren Energieverlust erlitten hat. Dies ist in Abb. 6.19 für Teilchen mit Austrittsenergien von 1oo - 18o keV (Kurven B) bzw. o - 1oo keV (Kurven C) gezeigt.

Unter den Bedingungen von Abb.6.19 wurden die Bahnen einzelner Projektile verfolgt, die unter die Oberfläche eingedrungen waren und von den [1$\bar{1}$o]-Atomketten geführt wurden. Der mittlere Energieverlust pro Länge dieser Projektile ist im Fall der Stoßparameter-Abhängigkeit um etwa einen Faktor o.7 kleiner als im Fall der Stoßparameter-Unabhängigkeit. Die Ergebnisse von Abb. 6.19 zeigen jedoch, daß unter den vorliegenden Bedingungen dieser Faktor einen vernachlässigbaren Einfluß auf Streuausbeute und, wie aus den Kurven B und C hervorgeht, auch auf die Energieverteilung der austretenden Teilchen hat.

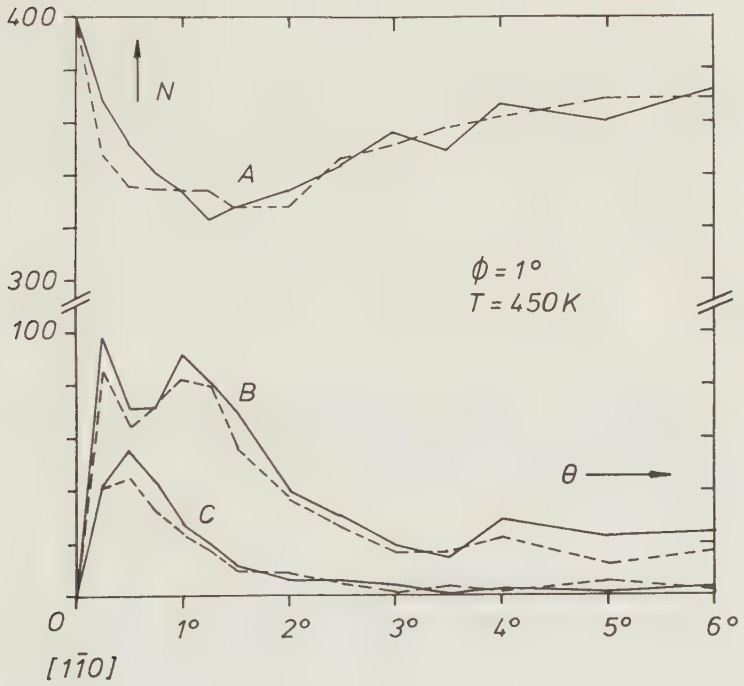



Abb. 6.19 : Einfluß der Stoßparameter - Abhängigkeit des elektronischen Energieverlusts auf die Anzahl der gestreuten Teilchen bei der axialen Oberflächen - Gitterführung ;
A : Teilchen im Energiebereich 0 - 200 keV
B : " 100 - 180 keV
C : " 0 - 100 keV
durchgezogen : Stoßparameter - abhängiger Energieverlust
gestrichelt : Stoßparameter - unabhängiger Energieverlust

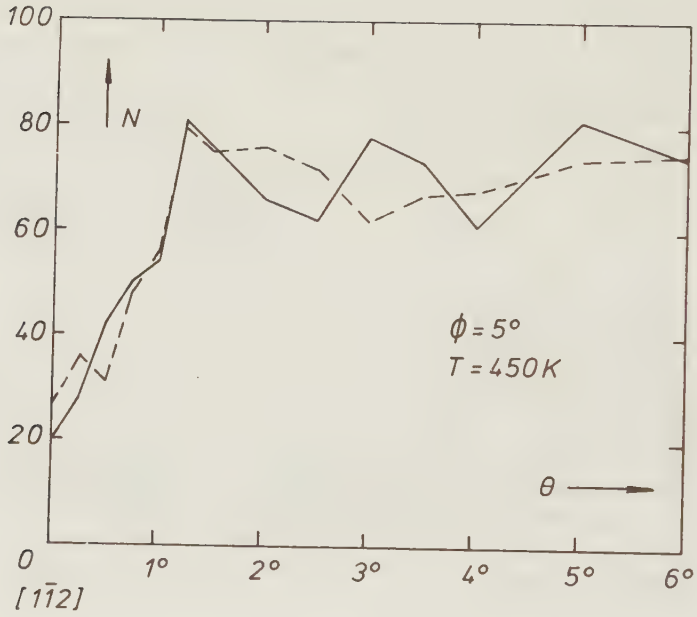



Abb. 6.20 : Einfluß der Stoßparameter - Abhängigkeit des elektronischen Energieverlusts auf die Anzahl der gestreuten Teilchen bei planarer Gitterführung an den ($\bar{1}$11) - Ebenen :
durchgezogen : Stoßparameter - abhängiger Energieverlust
gestrichelt : Stoßparameter - unabhängiger Energieverlust

Eine entsprechende Vergleichsrechnung für die planare Gitterführung an den ($\bar{1}$11)-Ebenen zeigt ebenfalls keinen bedeutsamen Einfluß der Stoßparameter-Abhängigkeit des Energieverlusts auf die Streuausbeute (Abb. 6.2o).

Die Deutungen der experimentellen Streuausbeuten durch die Computer-Siumlationen werden daher von der Unsicherheit in der Stoßparameter-Abhängigkeit des Energieverlusts nicht beeinflußt. Umgekehrt läßt sich die tatsächliche Abhängigkeit auch nicht aus diesen Vergleichen herleiten.

## 6.7 TARGETSTROM

Bei Einschuß der Ionen parallel zu niedrig indizierten Atomketten oder -ebenen werden im Targetstrom $I_T$ Maxima bzw. Minima beobachtet. Diese Extrema eignen sich u.a. zur einfachen und schnellen Justierung des Kristalls zum einfallenden Ionenstrahl.

Für den Fall der planaren Gitterführung an den ($\bar{1}$11)-Ebenen die von der [1$\bar{1}$2]-Richtung in der Oberfläche ausgehen (Abb. 6.15d) ist der Targetstrom $I_T$ als Funktion des seitlichen Einschußwinkels $\Theta$ in Abb. 6.21 zusammen mit der entsprechenden Computer-Simulation dargestellt. Er wird in dieser Abbildung mit der $He^+$-Lichtausbeute I verglichen. Für beide Größen ergeben sich Minima. Das Auftreten des Minimus in der $He^+$-Lichtausbeute bei planarer Gitterführung ist in Abs. 6.4 besprochen worden. Das Minimum im Targetstrom ist etwa halb so tief wie das der $He^+$-Lichtausbeute. Auch bei der planaren Gitterführung um die Einschußrichtungen [1$\bar{1}$o] und [oo1] ist jedem Minimum in der $He^+$-Lichtausbeute ein Minimum im Targetstrom zugeordnet.

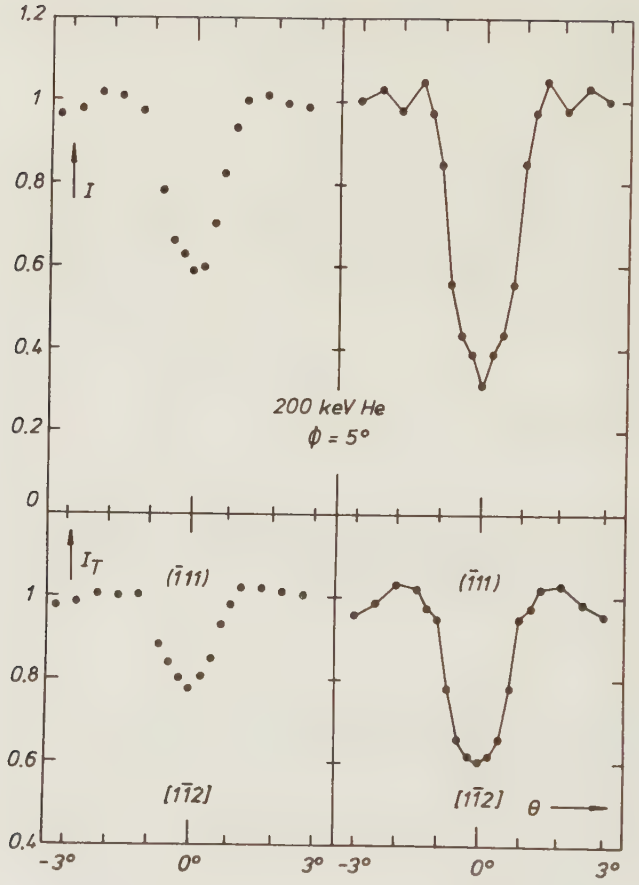



Abb. 6.21 : Vergleich zwischen der $He^+$ - Lichtausbeute I und dem Targetstrom $I_T$ bei planarer Gitterführung ;
links : Experiment
rechts : Computer - Simulation

Die Computer-Simulationen zeigen, daß das Minimum im Targetstrom dadurch entsteht, daß bei random-Einschuß mehr Ionenbahnen im Bereich der mittleren Ausdringtiefe der Sekundärelektronen ($\approx$ 1 nm) verlaufen als bei Einschuß parallel zu den Ebenen. Dies beruht auf der bei random-Einschuß erhöhten Wahrscheinlichkeit für einen Stoß, der das einfallende Ion in eine Richtung annähernd parallel zur Oberfläche ablenkt.

Die Ergebnisse der Computer-Simulationen (Abb. 6.21) geben die unterschiedliche Tiefe der Minima bei der Lichtausbeute und beim Targetstrom richtig wieder. Im Vergleich mit dem Experiment sind die Minima bei beiden Meßgrößen jedoch tiefer. Diese Abweichung wurde für die $He^+$-Lichtausbeute in Abs. 6.4 diskutiert.

Im Gegensatz zur planaren Gitterführung tritt bei der axialen Gitterführung ein Maximum im Targetstrom auf. Dies ist in Abb. 6.22 für die [1$\bar{1}$2]-Einschußrichtung bei reiner und bei sauerstoffbedeckter Oberfläche gezeigt. Der senkrechte Einschußwinkel war $\phi = 1^{o}$. Die Werte von Experiment und Computer-Simulation wurden jeweils auf den random-Wert der reinen Oberfläche normiert. Bei der reinen Oberfläche wird die Struktur der Targeststromkurve von der Computer-Simulation richtig wiedergegeben. Das Maximum ist jedoch höher als im Experiment. Dieses wird von den axial geführten Teilchen verursacht, die nach dem Eindringen unter die Oberfläche zwischen den Atomketten schlängeln. Dabei halten sie sich über große Strecken im Bereich der mittleren Ausdringtiefe der Sekundärelektronen auf. Die Lichtausbeuten für diese Einschußbedingungen werden in Abb. 7.4 gezeigt.

Wird die Oberfläche mit 1/3 Monolage Sauerstoff bedeckt, so steigt im Experiment der Targetstrom bei random-Einschuß um 1o % an. Das Maximum wird flacher. Der Anstieg des random-Werts wird auch in der Computer-Simulation gefunden, die

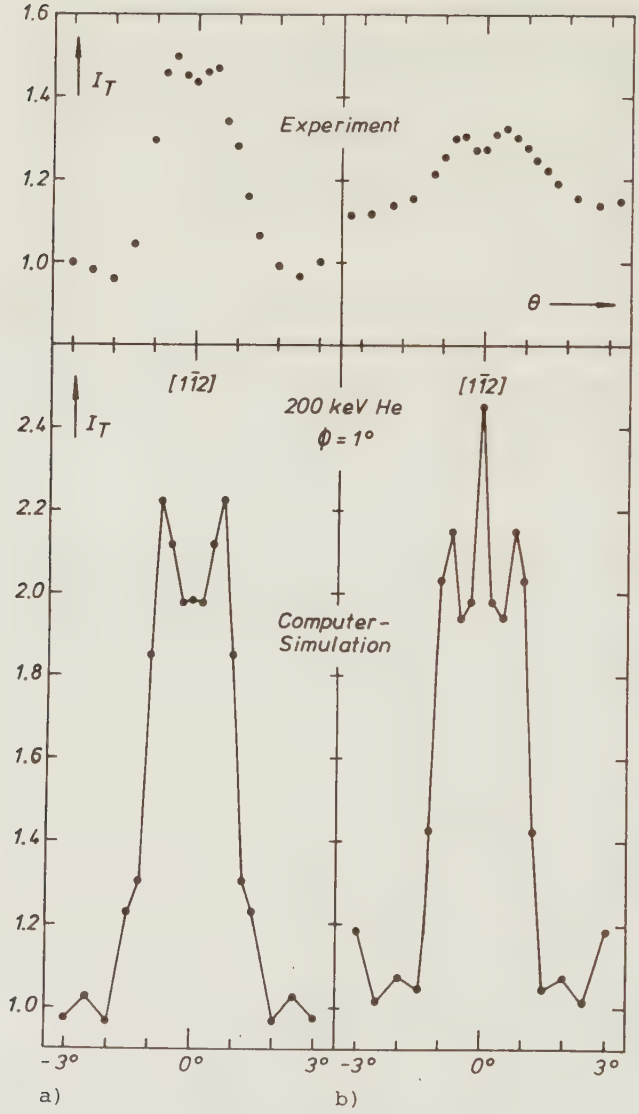



Abb. 6.22 : Targetstrom $I_T$ bei axialer Oberflächen - Gitterführung bei
a) reiner Oberfläche,
b) C = 1/3 Ml Sauerstoff

Verflachung des Maximums jedoch nicht. Dieser Unterschied wird auf die vereinfachenden Annahmen des Modells der Sekundärelektronen-Emission (Abs. 5.6) zurückgeführt.

Bei axialer Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$o]- und [oo1]-Richtung entstehen ebenfalls Maxima im Targetstrom. Bei Sauerstoff-Bedeckung werden Veränderungen der Kurvenform beobachtet. Es kann erwartet werden, daß die Position der Sauerstoffatome einen Einfluß auf diese Veränderungen hat. Eine Positionsbestimmung ist jedoch nur mit einer erweiterten Berücksichtigung der Mechanismen der Sekundärelektronen-Emission möglich.

# 7. POSITIONSBESTIMMUNG VON ADSORBIERTEM SAUERSTOFF DURCH AXIALE OBERFLÄCHEN-GITTERFÜHRUNG

## 7.1 ALLGEMEINES

Auf der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche wird bei einer Sauerstoff-Bedeckung von 1/3 Monolage ein deutlicher Rückgang der Haftwahrscheinlichkeit beobachtet (Abs. 4.4). Im folgenden wird die Positionsbestimmung der Sauerstoffatome bei dieser Bedeckung durch die axiale Oberflächen-Gitterführung von 2oo keV-He-Ionen beschrieben. Diese wurden unter dem senkrechten Einschußwinkel $\phi = 1^{o}$ bei Einfall um die $[1\bar{1}o]$-,[oo1]- und $[1\bar{1}2]$-Richtungen in der Oberfläche (Abb. 7.1 und 6.15a) eingeschossen. Die Lichtausbeute des $He^{+}$-468.6 nm-Übergangs wurde gemessen. Die Ergebnisse werden mit entsprechenden Computer-Simulationen verglichen, in denen alle in Abb. 7.1 angegebenen symmetrischen Positionen der Sauerstoffatome simuliert wurden. Zusätzlich wurde die Höhe der Sauerstoffatome variiert.

In den Computer-Simulationen wurde bei der Lichtanregung die Abregung (Abs. 5.8) und die Anregung beim Stoß mit einem Sauerstoffatom berücksichtigt. Nach Abs. 8.2.5 wird ein Projektil, das ein adsorbiertes Sauerstoffatom innerhalb eines kritischen Radius $r_c \approx a_o$ durchdringt, mit einer Wahrscheinlichkeit $\sim E^{3/2}$ (Gl. 5.42) angeregt. Danach wird die Abregung vernachlässigt (Abs. 8.2.3).

Bei den in den Abb. 7.2 - 7.4 gezeigten Vergleichen zwischen den Experimenten und Computer-Simulationen ist das Minimum der Lichtausbeute im Experiment jeweils weniger tief als in der Simulation. Eine Erklärung für diesen Unterschied

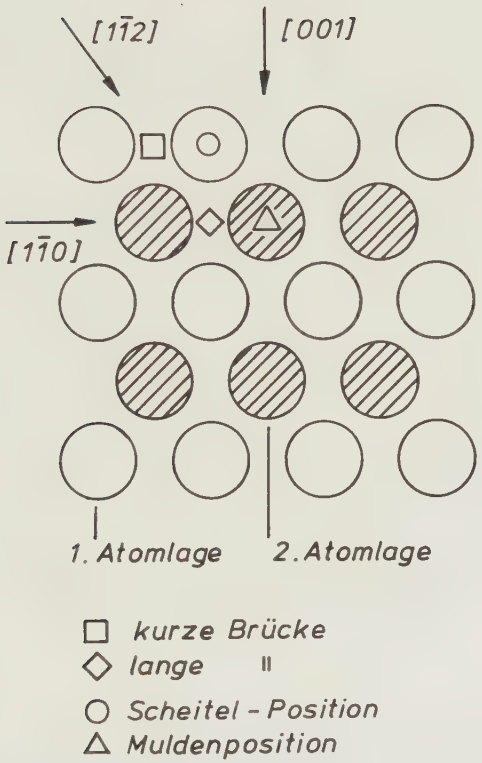



Abb. 7.1 : Verschiedene Adsorptionsplätze auf einer fcc - (110) - Oberfläche

besteht darin, daß in den Experimenten jeweils bereits eine geringe Menge an Restgasatomen adsorbiert war. Wird die Anregung an diesen Restgasatomen durch Unterdrückung der Abregung berücksichtigt, dann stimmen die Tiefen der Minima mit den Simulationen aufwärts-gestufter Oberflächen überein (Abs. 6.3). Die Simulationen wurden für alle Einschußrichtungen bei einem Aufwärts-Stufenabstand von 5o Atomabständen gerechnet.

Bei allen Experimenten zur Positionsbestimmung wächst die $He^+$-Lichtausbeute bei random-Einschuß durch die Sauerstoff-Bedeckung um etwa einen Faktor 1.5 an. Dieser Anstieg wird durch die Anregung an den Sauerstoffatomen verursacht, nach der die Abregung nicht mehr wirksam ist. In den Computer-Simulationen steigt die Lichtausbeute um einen Faktor 3.5 an. Der kleinere experimentelle Wert deutet, ebenso wie die geringere Tiefe der Minima, darauf hin, daß auf der nicht mit Sauerstoff bedeckten Oberfläche bereits Restgasatome adsorbiert waren. Für die Vergleiche in den Abb. 7.2 - 7.4 wurden die Daten der Experimente und der Computer-Simulationen jeweils auf den random-Wert normiert.

## 7.2 ERGEBNISSE DER EXPERIMENTE UND SIMULATIONEN

Die auf den Randomwert normierte $He^+$-Lichtausbeute I ist als Funktion des seitlichen Einschußwinkels $\Theta$ für die drei Einschußrichtungen [oo1],[1$\bar{1}$o]und [1$\bar{1}$2] in den Abb. 7.2 - 7.4 gezeigt. Die vollen Punkte sind die Ergebnisse für die reine Oberfläche. Die offenen Kreise gelten für die mit 1/3 Monolage Sauerstoff bedeckte Oberfläche. Die Experimente sind in A, die Simulationen in B dargestellt.

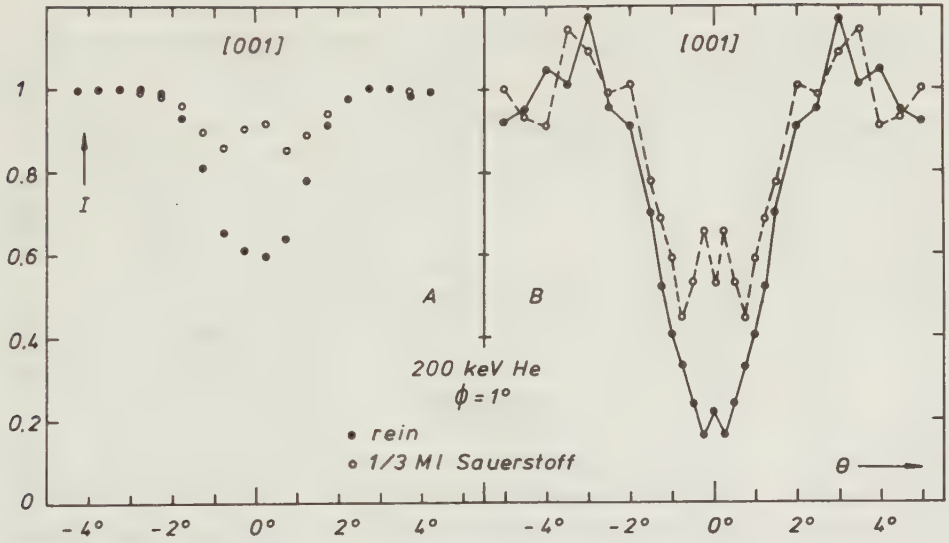



Abb. 7.2 : Positionsbestimmung durch axiale Oberflächen - Gitterführung entlang der [001] - Richtung ;
A : Experiment
B : Computer - Simulation

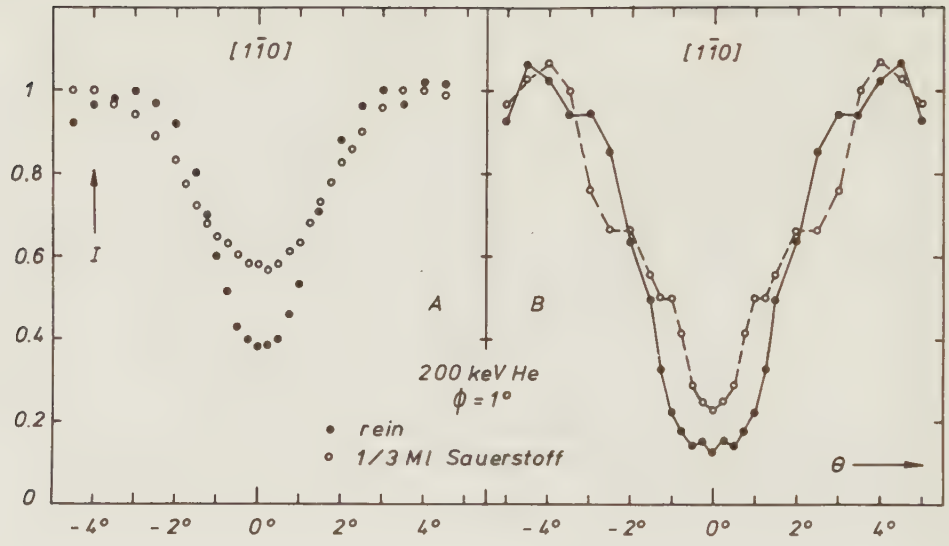



Abb. 7.3 : Positionsbestimmung durch axiale Oberflächen - Gitterführung entlang der $[1\bar{1}0]$ - Richtung ;
A : Experiment
B : Computer - Simulation

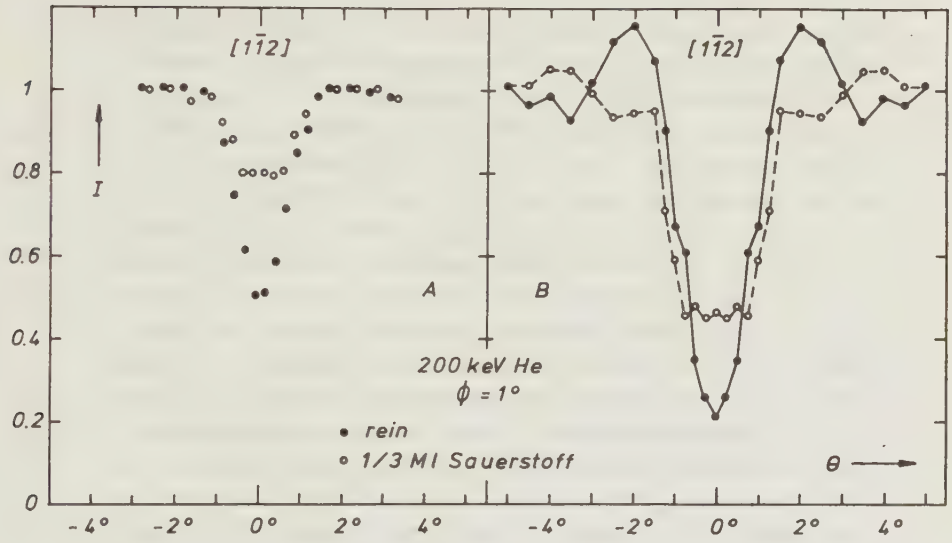



Abb. 7.4 : Positionsbestimmung durch axiale Oberflächen - Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$2] - Richtung ;
A : Experiment
B : Computer - Simulation

Bei allen Einschußrichtungen ergibt sich ohne Sauerstoff ein Minimum der Lichtausbeute bei parallelem Einschuß zu den Ketten ($\Theta = o^{\circ}$). Bei der [oo1]-Richtung entsteht bei Sauerstoff-Bedeckung ein relatives Maximum bei $\Theta = o^{\circ}$ (Abb. 7.2). Daraus kann geschlossen werden, daß die Sauerstoffatome das Eindringen der Ionen zwischen die [oo1]-Atomketten der Oberfläche blockieren. Dies läßt nach Abb. 7.1 entweder auf die zentrierende Position oder die kurze Brückenposition schließen. Diese Vermutung wird durch die Computer-Simulation (Abb. 7.2B) bestätigt, für die eine Position der Sauerstoffatome in der Mitte zwischen den [oo1]-Atomketten in einer Höhe von o.125 nm angenommen wurde. Aus der Flußdichteverteilung, die aus der Computer-Simulation erhalten wird, ergibt sich der Grund für das Maximum bei $\Theta = o^{\circ}$ bei Sauerstoffbedeckung: Die einfallenden Ionen werden an den Ketten der Sauerstoffatome korreliert gestreut und auf die darunter liegenden [oo1]-Ketten der obersten Atomlage des Kristalls gelenkt. Von dort werden sie reflektiert. Dieser Fall wurde im Zusammenhang mit Abb. 6.8 für die [1$\bar{1}$2]-Einschußrichtung diskutiert. Die Lichtausbeute steigt aufgrund der erhöhten Zahl der gestreuten Ionen.

Durch dieses Experiment kann die lange Brückenposition und die Scheitelposition (Abb. 7.1) ausgeschlossen werden. Zur Unterscheidung zwischen der kurzen Brückenposition und der Muldenposition wurde ein entsprechendes Experiment bei Einschuß um die [1$\bar{1}$o]-Richtung durchgeführt. Das Ergebnis zeigt Abb. 7.3. Es ergibt sich wieder ein Minimum, das sich bei Sauerstoffbedeckung verbreitert und verflacht. Diese Veränderungen bei Sauerstoffbedeckung werden durch die Computer-Simulation dann am besten wiedergegeben, wenn sich die Sauerstoffatome in o.125 nm Höhe über den [1$\bar{1}$o]-Ketten befinden. Das entspricht der Scheitelposition oder der kurzen Brückenposition in Abb. 7.1. Die Abregung bzw. die Anregung an den adsorbierten Atomen beeinflußt dabei in der Simulation wesentlich die Formveränderung des Minimums:

Ohne Abregungsmechanismus wird in der Computer-Simulation bei Sauerstoffbedeckung keine Verflachung für $|\Theta| > 2^{\circ}$ und eine Vertiefung des Minimums bei $\Theta = o^{\circ}$ gefunden. Dieser Unterschied war ein wesentlicher Grund, die Lichtanregung an adsorbierten Atomen zu untersuchen (Abs. 8) und in die Computer-Simulationen einzubeziehen.

Zusammen mit dem Ergebnis für die [oo1]-Richtung ist damit bereits die kurze Brückenposition als Adsorptionsplatz festgelegt. Zur Bestätigung dieses Ergebnisses wurde in einem weiteren Experiment die axiale Gitterführung ($\phi = 1^{\circ}$) in [1$\bar{1}$2]-Richtung untersucht. Der Verlauf der Lichtausbeute I als Funktion des seitlichen Einschußwinkels $\Theta$ ist bei dieser Richtung weniger von Oberflächenstufen abhängig als bei den anderen Einschußrichtungen, da sich an dem Ort, wo die Ionen bei $\Theta = o^{\circ}$ fokussiert werden, keine Ketten der zweiten Atomlage befinden (Abb. 6.7). Bei Sauerstoffbedeckung steigt nach Abb. 7.4A die Lichtausbeute bei $\Theta = o^{\circ}$ ähnlich wie bei der [oo1]-Richtung an. Daraus kann geschlossen werden, daß die Sauerstoffatome das Eindringen der Ionen zwischen die [1$\bar{1}$2]-Atomketten behindern. Nach Abb. 7.1 wird dadurch die kurze Brückenposition bestätigt. Die Simulation in Abb. 7.4B zeigt eine Übereinstimmung mit dem Experiment bei dieser Position der Sauerstoffatome und einer Höhe von o.125 nm.

## 7.3 SIMULATION VERSCHIEDENER HÖHEN DER SAUERSTOFFATOME

Der Einfluß einer Veränderung der Höhe der Sauerstoffatome, die sich in der kurzen Brückenposition befinden, auf die Lichtausbeute I der gestreuten $He^+$-Ionen wird in Abb. 7.5 für die [oo1]- und in Abb. 7.6 für die [1$\bar{1}$2]-Einschußrichtung gezeigt. Die Höhe wurde in 6 Schritten von o bis o.175 nm verändert. Wegen der Übersichtlichkeit wurden die normierten Kurven vertikal gegeneinander verschoben. Nach Tab. 6.2 ist ein Einfluß der Sauerstoffketten auf die Streuausbeute bei der [oo1]-Richtung für $|\theta| \lesssim o.77^o$, bei der [1$\bar{1}$2]-Richtung für $|\theta| \lesssim o.55^o$ zu erwarten. In diesen Bereichen treten in den Simulationen die Veränderungen in der Lichtausbeute bei verschiedenen Sauerstoff-Höhen auf.

Bei der [oo1]-Richtung (Abb. 7.5) ist der Schattenbereich der 1/3 Ml-Sauerstoff-Kette beim Auftreffen auf die Oberfläche schmaler als der Abstand der Metallatomketten. Die größte Reflektivität tritt deswegen bei kleinen Abweichungen von $\theta = o^o$ auf. Bei zunehmender Höhe wächst auch die Weite des Schattenbereichs am Ort der Oberfläche. Daher ist die Ausbildung eines relativen Maximums bei h = o.175 nm am deutlichsten. Die Simulationen stimmen mit dem Experiment unter Berücksichtigung der experimentellen Auflösung im Bereich o.1 nm $\leq$ h $\leq$ o.175 nm überein.

Für die [1$\bar{1}$2]-Richtung ist die Übereinstimmung mit dem Experiment dagegen bei h = o.125 nm eindeutig. Das Maximum, das bei größeren Werten von h auftritt, wurde im Experiment nicht gefunden. Dieses Maximum entsteht durch Übereinstimmung der Weite des Schattenbereichs mit dem Abstand der [1$\bar{1}$2]-Ketten in der Oberfläche. In Abb. 6.8 wurde die Flußdichteverteilung für diesen Fall bei einer Sauerstoff-Bedeckung von 1 Monolage gezeigt. Bei dieser Bedeckung tritt diese Übereinstimmung wegen der größeren Ablenkung an der dichteren Sauerstoff-Kette schon bei o.125 nm Höhe der Sauerstoffatome auf.

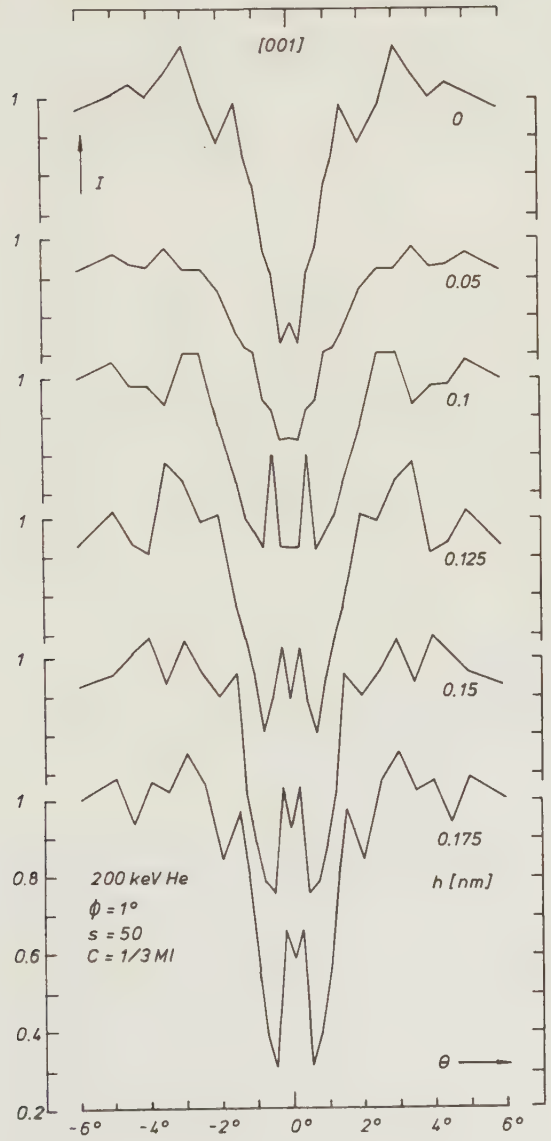



Abb. 7.5 : Variation der Höhe h der Sauerstoff - Atome bei der [001] - Richtung

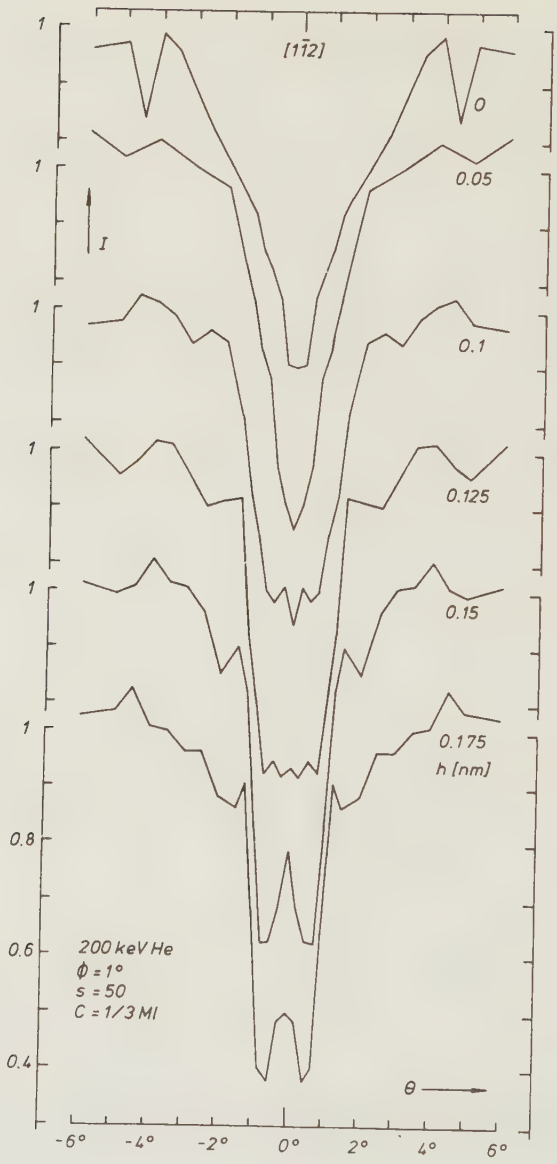



Abb. 7.6 : Variation der Höhe h der Sauerstoff - Atome bei der $[1\bar{1}2]$ - Richtung

Die Genauigkeit der Höhenangabe für die Sauerstoff-Atome von o.125 nm ist besser als ± o.oo25 nm. Daraus kann eine Metall-Sauerstoff-Bindungslänge von o.177 nm ± o.oo17 nm berechnet werden. Dieser Wert ist in Übereinstimmung mit der kovalenten Ni-O-Bindungslänge für die kurze Brückenposition von o.189 nm (1o6).

## 7.4 SIMULATION ANDERER SAUERSTOFF-POSITIONEN

Am Beispiel der [oo1]-Richtung wird in Abb. 7.7 gezeigt, wie sich die Adsorption der Sauerstoffatome in der langen Brückenposition auf die Lichtausbeute im Vergleich zur reinen Oberfläche auswirken würde. Bei dieser Simulation wurde eine Höhe h = o.125 nm angenommen. Beide Kurven sind auf den random-Wert normiert. Bei $\Theta = o^{o}$ ergibt sich keine bedeutsame Erhöhung in der Lichtausbeute, im Gegensatz zur kurzen Brückenposition (Abb. 7.2). Eine Erhöhung tritt dagegen bei $|\Theta| = 1^{o}$ auf. Auch bei den anderen Einschußrichtungen werden deutliche Unterschiede zwischen den Rechnungen für die beiden Positionen gefunden. Die lange Brückenposition steht daher im Widerspruch zum Experiment.

Für die Sauerstoff-bedeckte (11o)-Ni-Oberfläche wurde von van den Berg et al. (41) eine Rekonstruktion nach dem "missing row"-Modell vorgeschlagen. Bei diesem Modell fehlt jede zweite [oo1]-Ni-Kette in der Oberfläche. Dadurch wird die p(2 x 1)-LEED-Struktur erklärt. Die Projektion dieses Modells in eine Ebene senkrecht zur [1$\bar{1}$2]-Richtung in der Oberfläche ist in Abb. 7.8 dargestellt. In den [1$\bar{1}$2]-Atomketten (schraffiert) der Oberfläche fehlt jedes zweite Metallatom. Die Sauerstoffatome befinden sich in diesem Modell in der langen Brückenposition in einer Höhe von o.o5 nm. Für diese Höhe entspricht der Verlauf der Lichtausbeute in der Simulation nach Abb. 7.6 nicht dem des Experiments. Da die halbe Besetzung der [1$\bar{1}$2]-Ketten durch einen schmaleren Schattenbereich als in Abb. 6.7 das Eindringen der Ionen

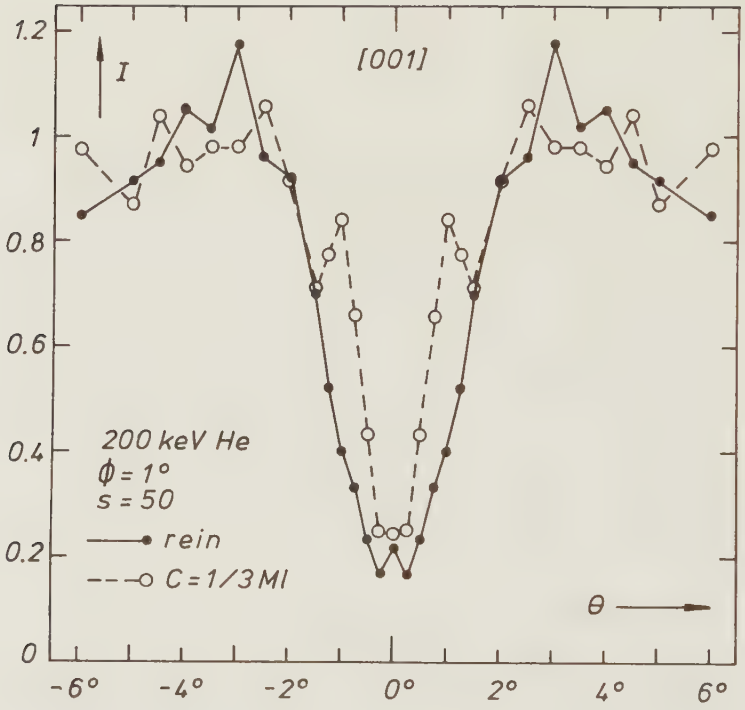



Abb. 7.7 : Computer - Simulation der Lichtausbeute I bei Adsorption der Sauerstoff - Atome in der langen Brückenposition ; vergl. Abb. 7.2 B

in den Kristall bei $\Theta = o^{o}$ noch begünstigt, kann diese Rekonstruktion für die (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche ausgeschlossen werden. Die Untersuchungen der Oberfläche mit AES, LEED und Austrittsarbeitsänderung in Abs. 4 ergaben ebenfalls einen anderen Verlauf der Reaktion der (11o)-6o/4o-NiFe-Oberfläche mit Sauerstoff, als er bei der (11o)Ni-Oberfläche gefunden wird.

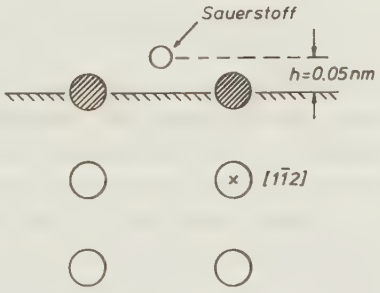



Abb. 7.8 :
" Missing row " - Modell, Projektion in die [1$\bar{1}$2] - Richtung

## 7.5 BEWERTUNG DER LICHTANREGUNGSMETHODE

Die Ergebnisse von Abs. 8 zeigen, daß die Lichtausbeute nicht nur von der Anzahl der gestreuten Ionen abhängt, sondern auch von der Anregung an adsorbierten Atomen. Dieser Einfluß ist als Komplikation zu betrachten, besonders, da auch geringe Mengen adsorbierter Restgasatome die Lichtanregung beeinflussen können. Zur Positionsbestimmung müssen diese Einflüsse ausreichend bekannt sein. Der Vorteil der Lichtanregungsmethode liegt darin, daß keine Nachweisgeräte für die Ionen in die Vakuumapparatur eingebaut werden müssen.

Um die Schwierigkeiten der Lichtanregungsmethode im Hinblick auf die Positionsbestimmung adsorbierter Atome zu umgehen, wurde in weiterführenden Experimenten (9o) die Anzahl der gestreuten Ionen direkt durch einen Faraday-Auffänger gemessen. Dabei konnte die Rekonstruktion einer (11o)-Ni-Oberfläche nachgewiesen werden.

# 8. EXPERIMENTE UND SIMULATIONEN ZUR LICHTANREGUNG UND POLARISATION

## 8.1 ALLGEMEINES

### 8.1.1 Lichtanregung und Polarisation als Oberflächeneffekt

Zur Auswertung der Streuexperimente im Hinblick auf die Positionsbestimmung von adsorbierten Atomen war es notwendig, die Bedingungen für die optische Anregung der Projektile durch geeignete Experimente näher zu untersuchen. Dazu wurden neben der Lichtausbeute I auch die Komponenten der Zirkularpolarisation S/I und der Linearpolarisationen C/I und M/I (Abs. 3.3.2) sowohl für den 468.6 nm (n-4-3)-Übergang des $He^+$-Ions als auch für den 587.6 nm ($3^3D \rightarrow 2^3P$)-Übergang des $He^0$-Atoms gemessen.

Die erste Beobachtung von zirkularpolarisiertem Licht, das von Ionen nach Transmission durch eine geneigte Folie ausgesendet wird, durch Berry et al. (12) bestätigte, daß die optische Anregung im Oberflächenbereich eintritt. Aus Symmetriegründen wäre nach einer Anregung im Inneren der Folie keine Zirkularpolarisation zu erwarten.

Zirkularpolarisiertes Licht wurde auch nach Streuung von Ionen an polykristallinen (1o7-113) und einkristallinen Oberflächen (114-118) beobachtet. Oberflächenverunreinigungen erniedrigen die Zirkularpolarisation (113, 115, 117, 119-121). Bei Streuung an Einkristallen hängt die Zirkularpolarisation von der Orientierung des einfallenden Ionenstrahls zu kristallographischen Richtungen ab (114,115).

Ein Anstieg der H-Balmer-α-Lichtausbeute bei Bedeckung einer Molybdän-Oberfläche mit Sauerstoff wurde von Rausch et al. (122) und Leung et al. (94) gefunden.

### 8.1.2 Theorien zur Entstehung von zirkularpolarisiertem Licht

Schröder und Kupfer (123) haben die Entstehung von zirkularpolarisierter H-Balmer-α-Strahlung durch Elektroneneinfang an einer Metalloberfläche durch ein theoretisches Modell beschreiben: Sie berechneten die Übergangsamplitude $U_f(\vec{K},t)$ eines Elektrons aus dem Zustand $\psi_K^M$ im freien Elektronengas des Festkörpers (Wellenvektor $\vec{K}$) in den Zustand $\psi_f^H$ des Wasserstoffatoms zur Zeit $t_1$ ($t_1 \to \infty$) nach einer Stoßparameterversion der Brinkmann-Kramers-Näherung von Trubnikov und Yavlinskii für $v >> v_B$ (Bohr'sche Geschwindigkeit):

$$U_f(\vec{K}) = U_f(t = \infty, \vec{K}) =$$

$$= \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \iiint_{-\infty}^{+\infty} d^3r \; \psi_f^{H*}(\vec{r},t) \cdot V_p \cdot \psi_K^M(\vec{r},t) \qquad (8.1)$$

Darin ist $V_p = -e^2/|\vec{r}-\vec{r}_p|$ das Potential des Protons, das sich am Ort $\vec{r}_p$ befindet ("prior"-Formulierung). $t = 0$ ist der Zeitpunkt, zu dem das Proton die Oberfläche verläßt.

In einer Näherung werden anschließend die Einflüsse der elektronischen Zustände im Inneren des Metalls vernachlässigt, d.h. nur der Beitrag des exponentiellen Abfalls der Metallelektronendichte senkrecht zur Oberfläche wird berücksichtigt. Diese Näherung gilt in dem Grenzfall exakt, wenn das Potential erst in großen Abständen von der Oberfläche wirksam wird.

Aus Gl. 8.1 ergeben sich die Elemente der Dichtematrix $\rho_{mm'}$ für die Zustände n = 2, l = 1, m des Wasserstoffatoms zu

$$\rho_{mm'} = \iiint_{K_z \geq 0} d^3K \, u_{2,1,m}(\vec{K}) \, u^*_{2,1,m'}(K')$$

Daraus werden die Stokes-Parameter I, M, C und S berechnet. S/I wächst beim Übergang von senkrechtem zu streifendem Austritt von 0 auf 0.9 (für $v_B/v = 0.7$) an. Eine mögliche Reduzierung der Polarisation durch Elektroneneinfang an adsorbierten Atomen wird erwähnt.

Die Entstehung der Zirkularpolarisation wird in einem halbklassischen Bild so zusammengefaßt: Im Bezugssystem des mit der Geschwindigkeit $\vec{v}$ fliegenden Protons haben die Metallelektronen im Mittel die Geschwindigkeit $-\vec{v}$. Die Abnahme der Dichte $n_e$ der Metallelektronen in der Umgebung des Protons wird in linearer Näherung durch den Gradienten $\vec{\nabla} n_e$ am Ort des Protons beschrieben. Mittelt man über die Wahrscheinlichkeiten für den Elektroneneinfang an verschiedenen Orten in der Umgebung des Protons, so ergibt sich für den Mittelwert des Drehimpulses in bezug auf das Proton:

$$\langle \vec{J} \rangle \sim [-\vec{\nabla} n_e \times \vec{v}] \qquad (8.2$$

Daher werden überwiegend Niveaus dieser Drehimpulsorientierung besetzt.

Von Tolk et al. (115) werden Übergangs-Matrixelemente für verschiedene Anregungs-, Einfang- und Ionisationsprozesse in bezug auf angeregte Zustände des Wasserstoffatoms angegeben und diskutiert. Dabei wird ("post"-Formulierung) als Störpotential das effektive Potential $\tilde{V}_{(x)}$ aller Elektronen des Elektronengases benützt, das nur von der Koordinate x senkrecht zur Oberfläche abhängt. Die Berechnung dieser

Matrixelemente wird lediglich soweit durchgeführt, daß Symmetrie-Aussagen über den angeregten Zustand nach dem Einfang möglich sind. Danach ist nur von nahezu resonanten Elektroneneinfangs- und Ionisationsprozessen Zirkularpolarisation zu erwarten. Dieser Effekt wird halbklassisch wie bei Schröder und Kupfer durch Drehimpulsübertragung im Gradienten des Elektronendichte-Ausläufers der Oberfläche erklärt. Eine quantitative Aussage wird für niedrige Geschwindigkeiten ($v < 0.63\ v_o$) nicht für sinnvoll gehalten. Die Phasenentwicklung der Polarisation im elektrischen Feld der Oberfläche wird diskutiert.

## 8.2 ERGEBNISSE FÜR DIE $HE^+$-468.6 nm-STRAHLUNG

### 8.2.1 S/I als Funktion der Sauerstoffbedeckung

Die Abhängigkeit der Zirkularpolarisation S/I des $He^+$-468.6 nm- und des $He^o$-587.6 nm-Übergangs von der Sauerstoffbedeckung ist in Abb. 8.1 als Funktion der Sauerstoff-Aussetzung p·t zusammen mit dem 51o eV-Sauerstoff-Augersignal gezeigt. Der senkrechte Einschußwinkel zur Oberfläche war $\phi = 5^o$, der seitliche Einschußwinkel $\Theta$ war random.

Bei beiden Übergängen nimmt die Zirkularpolarisation proportional zur anwachsenden Sauerstoffbedeckung um $\Delta(S/I) = -0.08$ ab. Eine Verringerung von S/I durch adsorbierte Gase wurde auch von anderen Autoren gefunden. Die Zirkularpolarisation kann dabei völlig verschwinden, wenn die Oberfläche stark durch Kohlenwasserstoffe des Restgases bedeckt wird (12o). Die Ursache dafür wird in Abs. 8.2.5 diskutiert.

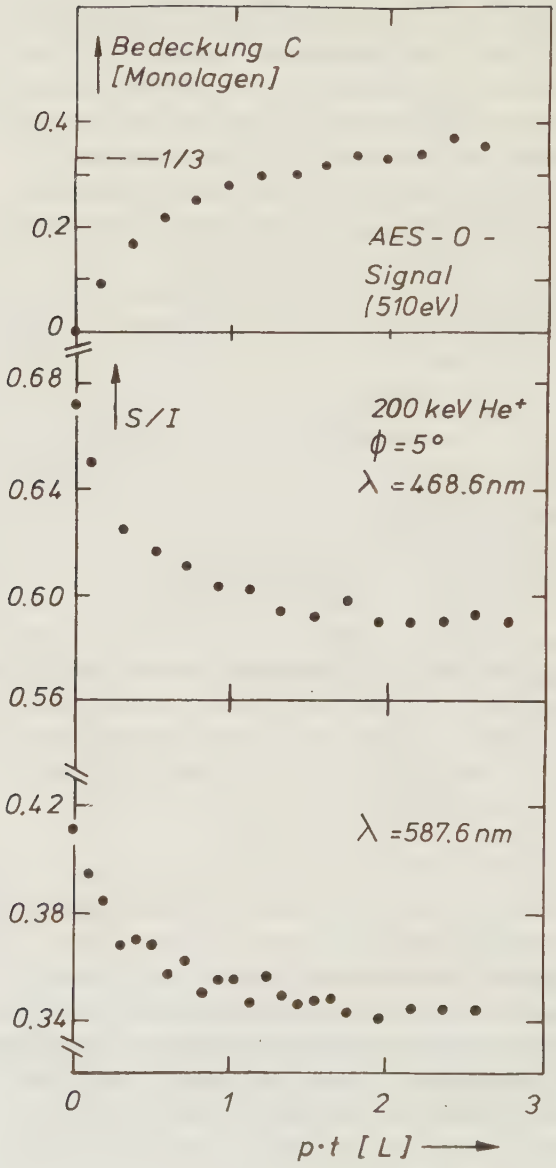



Abb. 8.1 : Sauerstoff - Bedeckung C und Zirkularpolarisation S/I als Funktion der Aussetzung p · t

### 8.2.2 Lichtausbeute als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\phi$

Der senkrechte Einschußwinkel $\phi$ von 2oo keV $He^+$-Ionen wurde im folgenden Experiment von o.25° bis 6° variiert. Der seitliche Einschußwinkel $\Theta$ war 18.5° zur [1$\bar{1}$o]-Richtung in der Oberfläche (random). Dabei werden Gitterführungs-Effekte für alle eingestellten Winkel $\phi$ vermieden. Die optische Blende, die den Nachweisbereich bestimmt (Abs. 3.3.1) wurde senkrecht gestellt, um den Einfluß der veränderlichen Neigung der Kristall-Oberfläche klein zu halten. Dabei werden Teilchen mit Austrittswinkel bis zu 6o° erfaßt.

Die gemessene Lichtausbeute I des $He^+$-468.6 nm-Übergangs ist in Abb. 8.2, normiert auf eine konstante Zahl auf die Oberfläche einfallender Ionen, als Funktion von $\phi$ aufgetragen. Die gestrichelte Linie stellt das Ergebnis einer Computer-Simulation für die Anzahl der gestreuten Teilchen dar, die durchgezogene Linie ist die in dieser Simulation berechnete Lichtausbeute. Diese Lichtausbeute ist an den experimentellen Wert bei $\phi = 2°$ angepaßt.

Die Messungen sind bei verschiedenen Zuständen der Oberflächenreinheit durchgeführt worden. Die vollen Punkte sind das Ergebnis einer Meßreihe, die bei $\phi = 1°$ unmittelbar nach der Reinigung begonnen wurde. Die offenen Kreise zeigen die Lichtausbeute 15 min nach der Reinigung. Nach dieser Zeit ist bereits 1/1o Monolage Restgas auf der Oberfläche adsorbiert. Die Kreuze wurden in einer Messung erhalten, bei der die Oberfläche mit 1/3 Monolage Sauerstoff bedeckt war.

Bei $\phi \geq 2°$ durchdringen die meisten Projektile die erste Atomebene. Ein Teil davon kann von den tiefer liegenden Atomen zur Oberfläche zurückgestreut werden. Dieser Teil

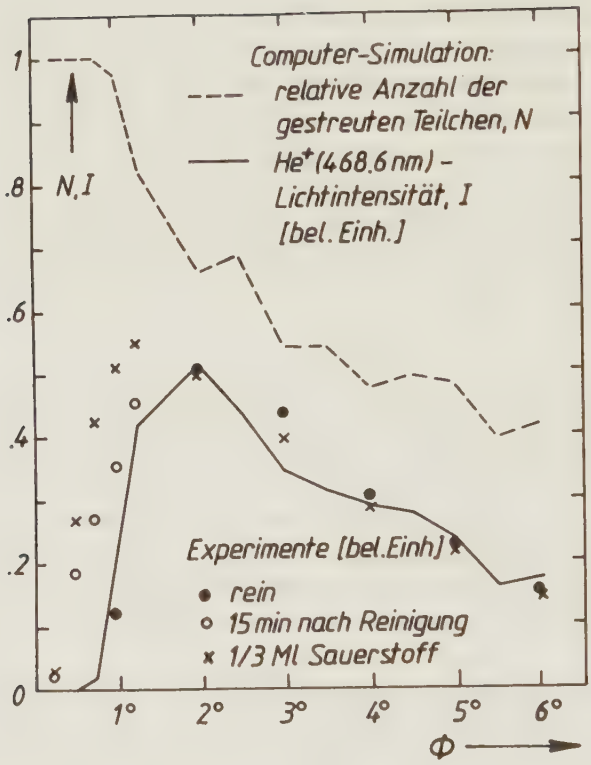



Abb. 8.2 : $He^+$ - 468.6 nm - Lichtausbeute I nach Streuung von 200 keV He - Projektilen als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\Phi$ bei verschiedenen Zuständen der Reinheit der Oberfläche ; Vergleich zwischen Computer - Simulation und Experiment

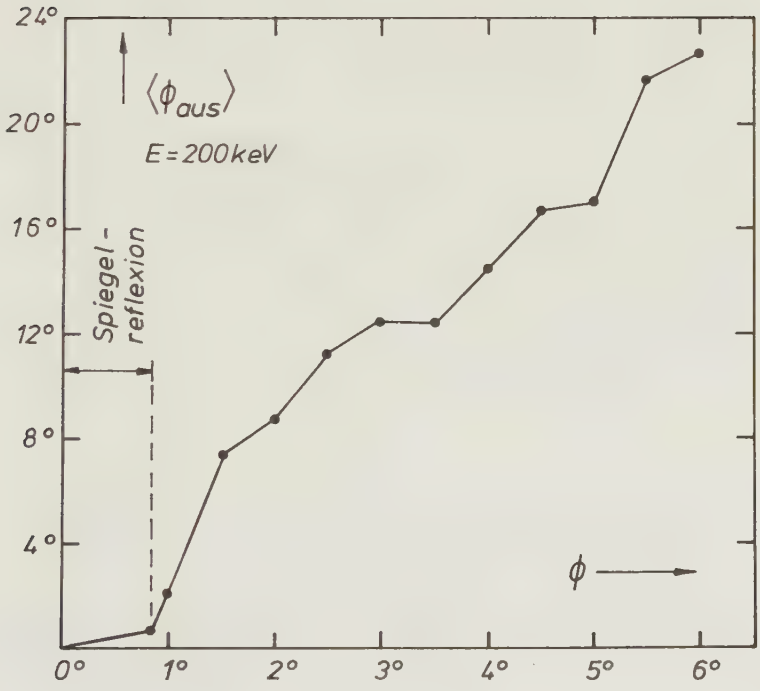



Abb. 8.3 : Mittelwert $\langle \phi_{aus} \rangle$ der Austrittswinkel der gestreuten Teilchen als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\phi$

nimmt mit zunehmendem Winkel $\phi$ ab. Deshalb sinkt auch die Lichtausbeute ab. Zusätzlich fällt die mittlere Austrittsenergie aufgrund der zunehmenden Eindringtiefe und der zurückgelegten Strecke im Kristall. Dieser Effekt trägt wegen der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Lichtanregung nach Gl. 5.42 ebenfalls zur Verringerung der Lichtausbeute bei. In diesem Winkelbereich gibt es keine signifikanten Unterschiede zwischen den Messungen bei verschiedenen Bedeckungszuständen.

Für $\phi < 2^{o}$ nimmt die Lichtausbeute mit kleiner werdendem Winkel $\phi$ stark ab, obwohl nach der Computer-Simulation der Anteil an gestreuten $He^{+}$-Ionen und deren mittlere Energie noch anwächst. Diese Abnahme der Lichtausbeute kann durch einen Auger-Abregungsprozeß oder Resonanz-Ionisations-Prozeß erklärt werden. Wie in Abs. 5.8 beschrieben wurde, kann ein solcher Abregungsmechanismus mit $v_c = 2.5 \cdot 10^{7}$ cm/s die Lichtemission angeregter $He^{+}$-Ionen mit Austrittswinkeln senkrecht zur Oberfläche $\phi_{aus} \leq 2^{o}$ stark unterdrücken. Bei der Berechnung der durchgezogenen Kurve in Abb. 8.2 wurde in der Computer-Simulation der oben angegebene Wert verwendet. Werte für $v_c$, die um einen Faktor 2 größer oder kleiner waren als $2.5 \cdot 10^{-7}$ cm/s ergaben eine schlechtere Übereinstimmung der Rechnung mit dem Experiment. Diese Rechnungen wurden mit dem getrennten Auswertungs-Programm durchgeführt, in dem Dopplereffekt und Laufzeiten in den Dimensionen des Nachweisbereichs berücksichtigt werden.

Um die Auswirkung des Abregungs-Mechanismus auf die Lichtausbeute in Abb. 8.2 zu erklären, ist als ein Ergebnis der Computer-Simulation in Abb. 8.3 der Mittelwert $\langle \phi_{aus} \rangle$ der Austrittswinkel aller mit $\phi_{aus} \leq 60^{o}$ gestreuten Teilchen als Funktion des Einschußwinkels $\phi$ gezeigt. Für $\phi \leq 0.9^{o}$ werden die Ionen mit $\phi_{aus} = \phi$ spiegelnd reflektiert.

In diesem Bereich ist wegen der Abregung bei diesen kleinen Austrittswinkeln kein Licht beobachtbar. Für $0.9^{o} < \phi < 2^{o}$ wächst $\langle \phi_{aus} \rangle$ stark an. Dadurch wird der Abregungsmechanismus weniger wirksam. Für $\phi > 2^{o}$ beruht der Rückgang der Lichtausbeute fast ausschließlich auf der abnehmenden Zahl der gestreuten Teilchen.

Im Bereich der Spiegelreflexion nimmt die $He^{+}$-468.6 nm-Lichtausbeute beträchtlich zu, wenn die Oberfläche mit adsorbierten Atomen bedeckt ist. In Abb. 8.2 sind entsprechende Meßergebnisse für Restgas- und Sauerstoff-bedeckte Oberflächen gezeigt. Bei einem Restgasdruck von $2 \cdot 10^{-10}$ mbar sind, unter der Annahme eines Haftkoeffizienten von 1, 15 min nach der Reinigung der Oberfläche 0.1 Monolagen adsorbiert (offene Kreise). Die vollen Punkte stammen aus einer Messung, für die die Oberfläche unmittelbar nach der Reinigung mit 1/3 Monolage Sauerstoff bedeckt wurde. Diese drei Meßreihen zeigen, daß die Lichtausbeute mit zunehmender Bedeckung ansteigt.

### 8.2.3 Abregung nach Anregung an adsorbierten Atomen

Das Anwachsen der Lichtausbeute bei $\phi \leq 2^{o}$ im zuvor beschriebenen Experiment mit zunehmender Sauerstoffbedeckung wird im folgenden durch die Anregung der Projektile durch Stöße mit den adsorbierten Atomen erklärt. Bei Sauerstoff-freier Oberfläche unterliegen die $He^{+}$-Ionen, die beim Durchtritt durch die Oberfläche angeregt werden, einem Abregungsmechanismus (93) mit einer Überlebenswahrscheinlichkeit W(vergl. Gl. 5.43):

$$W = \exp\left[-\frac{v_c}{v_\perp}\right] \qquad (8.3)$$

Darin ist $v_\perp$ die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zur Oberfläche. Die Bedeutung der charakteristischen Geschwindigkeit $v_c$ ergibt sich aus folgenden Überlegungen:

Die Wahrscheinlichkeit pro Zeit, daß ein angeregtes Teilchen in einer Entfernung s von der Oberfläche durch Wechselwirkung mit dem Elektronengas abgeregt wird, sei R(s). Cobas und Lamb (124) haben R(s) im Bereich $0 \leq s \leq 10\, a_o$ für die Austausch-Auger-Abregung eines metastabilen He-Atoms ($2^3S$ - Zustand) in den Grundzustand berechnet. Für $s \gtrsim 0.3$ nm gilt annähernd:

$$R(s) = A \cdot \exp[-2\alpha s]$$

Für $0 \leq s \leq 3\, a_o$ nimmt R(s) mit abnehmendem Abstand s zur Oberfläche weniger stark zu. Der Verlauf von R(s) kann in diesem Bereich durch

$$R(s) = A' \cdot \exp[-\alpha s] \qquad (8.4)$$

angenähert werden. Durch $\alpha$ wird der Abfall der Wellenfunktion $\psi$ des Grundzustandes beschrieben. Wird Gl. 8.4 auf die Abregung des $He^o$-$3^3D$-Zustands (oberes Niveau des 587.6 nm-Übergangs) bzw. des $He^+$-n=4-Zustands (oberes Niveau des 468.6 nm-Übergangs) übertragen, so gilt für die entsprechenden Grundzustände (124, 125):

$He^+ - 1\,s$ : $\psi \sim \exp[-2\, r/a_o]$ ; $\alpha = 2/a_o$

$He^o - 1\,S$ : $\psi \sim \exp[-1.69\, r/a_o]$; $\alpha = 1.69/a_o$

Die Anregung möge in der Entfernung $s_o$ von der Oberfläche stattfinden. Die Anzahl der dabei angeregten Teilchen sei $N_o(s_o)$. Die Anzahl der im Zeitintervall dt abgeregten Teilchen ist :

$$dN(s) = -N(s) \cdot R(s) \cdot dt$$

Die Anzahl $N(\infty)$ der im Abstand $s \to \infty$ noch angeregten Teilchen ergibt sich daraus zu:

$$N(\infty) = N_o \cdot \exp\,[-v_c/v_\perp] \quad , \tag{8.5}$$

wobei

$$v_c = \int_{s_o}^{\infty} R(s)\, ds$$

Wegen des schnellen Abfalls von $R(s)$ kann die Näherung für $s \leq 3\, a_o$ (Gl. 8.4) verwendet werden:

$$v_c = \frac{A'}{\alpha} \cdot e^{-\alpha s_o} \tag{8.6}$$

$v_c$ hängt daher vom Ort $s_o$ der Anregung ab. Die Wahrscheinlichkeit W, daß ein Teilchen, das bei $s_o$ angeregt wurde, ohne Abregung die Oberfläche verlassen kann, ist damit

$$W = N(\infty)/N_o = \exp\,[-v_c/v_\perp] \tag{8.7}$$

(vergl. Gl. 8.3).

Rausch et al. (122) und Leung et al. (94) haben die Lichtemission von Wasserstoff nach der Streuung von Protonen an einer Molybdän-Oberfläche gemessen. In beiden Arbeiten wurde ein Abregungsmechanismus nach Gl. 8.3 mit $v_c = 1.6 \cdot 10^8$ cm/s und ein Anwachsen der Lichtintensität bei Bedeckung der Oberfläche mit Sauerstoff gefunden. Zur Erklärung dieses Effekts wird angenommen, daß sich $v_c$ in Gl. 8.7 durch "Erhöhung der Potentialbarriere" (122) bzw. durch "reduzierte Überlappung" (94) der Wellenfunktionen verkleinert.

Nach Gl. 8.6 kann eine größere Überlebenswahrscheinlichkeit jedoch auch durch einen größeren Wert $s_o'$ des Orts der Anregung hervorgerufen werden. Bei einer Anregung durch ad-

sorbierte Atome in einer Höhe von $s_o$ = o.1-o.3 nm über der Oberfläche ist danach die Überlebenswahrscheinlichkeit größer als nach der Anregung beim Austritt aus dem Elektronengas der Metalloberfläche ($s_o \approx a_o$).

Die verringerte Wirksamkeit der Abregung nach Anregung an adsorbierten Atomen kann mit Gl. 8.6 abgeschätzt werden: Das Verhältnis der charakteristischen Geschwindigkeit $v_c'$ bei Anregung an einem adsorbierten Sauerstoffatom ($s_o'$ = o.125 nm) zur charakteristischen Geschwindigkeit $v_c$ = 2.5 · $1o^7$ cm/s für den $He^+$- bzw. 1.2 · $1o^8$ cm/s für den $He^o$-Übergang nach Anregung an der Metalloberfläche ($s_o \approx a_o$ = o.o529 nm) ist:

$$\frac{v_c'}{v_c} = \exp\left[-\alpha(s_o' - s_o)\right]$$

$$= o.o65 \text{ für } He^+ - 468.6 \text{ nm} \qquad (8.8)$$

bzw. $= o.1$ für $He^o$ - 587.6 nm

Für ein mit 2oo keV unter $2^o$ austretendes He-Teilchen ($v_\perp$ = 1.o9 · $1o^7$ cm/s) ist damit die Überlebenswahrscheinlichkeit nach Gl. 8.7 für den $He^+$-468.6 nm-Übergang: W = o.86; für den $He^o$-587.6 nm-Übergang: W = o.33. In der Computer-Simulationen wurde deshalb die Abregung des $He^+$-Übergangs nach der Anregung an adsorbiertem Sauerstoff vernachlässigt. Die Abregung des $He^o$-Übergangs ist dagegen auch nach der Anregung an adsorbiertem Sauerstoff wirksam. Ihre Auswirkung wird im Zusammenhang mit den Polarisationsmessungen an diesem Übergang in Abs. 8.3.1 diskutiert.

### 8.2.4 S/I als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\phi$

Die Zirkularpolarisation S/I ist neben der Lichtausbeute I bei den in Abb. 8.2 beschriebenen Experimenten wegen der längeren Meßzeit nur für die Restgas-bedeckte Oberfläche (15 min nach der Reinigung) und die mit 1/3 Ml Sauerstoff bedeckte Oberfläche gemessen worden. Die Ergebnisse zeigt Abb. 8.4. Die offenen Kreise gelten für die Restgas-bedeckte Oberfläche (o.1 Ml), die Kreuze für die Sauerstoff-bedeckte Oberfläche (1/3 Ml). Im ersten Fall erreicht S/I den Wert o.8, der im Bereich $2^{o} \leq \phi \leq 6^{o}$ nahezu konstant bleibt. Das Vorzeichen von S/I ist dabei positiv. Das entspricht einer Drehung des elektrischen Feldvektors im Uhrzeigersinn (Abs. 3.3.2). Dieser Drehsinn wird in den meisten Fällen bei der Anregung an einer geneigten Oberfläche gefunden und kann durch anisotropen Elektroneneinfang (Abs. 8.1.2) erklärt werden.

### 8.2.5 Zirkularpolarisation durch Anregung an adsorbierten Atomen

Wie in Abb. 8.1 gezeigt wurde, nimmt S/I proportional zum Anwachsen der Sauerstoffbedeckung ab. Zur Erklärung dieses Effekts wird im folgenden ein Bild von Wittmann und Andrä (126) und Winter (127) benützt, mit dem die Beobachtung von zirkularpolarisiertem Licht nach Stößen von Ionen mit freien Gasatomen erklärt wurde. In diesem Bild wird das Modell von Schröder und Kupfer (Anregung durch Elektroneneinfang an einer Oberfläche) auf die Anregung an einem Atom übertragen. Das Vorzeichen der Drehimpulsübertragung während des Stoßes wird danach durch die Richtung des Elektronendichtegradienten des Atoms am Ort des Projektils bestimmt. Das angeregte Elektron des Projektils dreht sich im Uhrzeigersinn, wenn das Projektil das adsor-

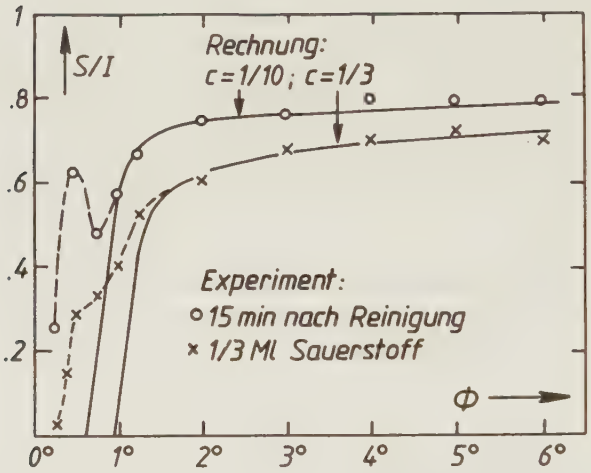



Abb. 8.4 : Zirkularpolarisation S/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung von Abb. 8.2 als Funktion des senkrechten Einschußwinkels $\phi$ . Durchgezogene Linien : Rechnungen nach Gl. 8.9 und 8.10

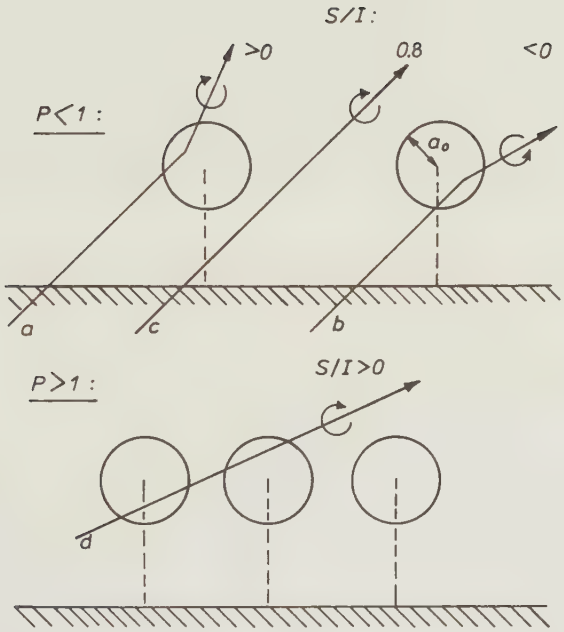



Abb. 8.5: Mögliche Bahnen austretender He - Projektile durch adsorbierte Atome und die sich ergebenden Vorzeichen der Zirkularpolarisation S/I ; P bezieht sich auf Gl. 8.9

bierte Atom über seinem Mittelpunkt trifft (Abb. 8.5, Weg a). Diese Anregung führt zu einem positiven Wert von S/I. Ein negatives Vorzeichen ergibt sich dagegen, wenn ein Ion das adsorbierte Atom von unten trifft (Abb. 8.5, Weg b). Wenn beide Wege gleich wahrscheinlich sind, ist der Mittelwert von S/I gleich Null, falls alle Ionen nachgewiesen werden, die auf diese Weise angeregt wurden. Die Möglichkeit einer solchen Wechselwirkung der Ionen mit adsorbierten Atomen als Ursache für eine Verringerung der beobachteten Zirkularpolarisation ist von Schröder und Kupfer (123) erwähnt worden.

Im folgenden wird diese Verringerung von S/I abgeschätzt. Dazu wird angenommen, daß ein Projektil, das ein adsorbiertes Atom innerhalb eines kritischen Abstands $r_c$ trifft, mit einer Wahrscheinlichkeit in das n = 4-Niveau angeregt wird, die gleich der Wahrscheinlichkeit ist für die Anregung durch Wechselwirkung mit der sauberen Oberfläche. Wenn Stöße mit den adsorbierten Atomen von oben und von unten gleich wahrscheinlich sind, ist die Verringerung von S/I proportional zu dem Teil der gestreuten $He^+$-Ionen, der die adsorbierten Atome innerhalb $r_c$ trifft. Ein solcher kritischer Abstand, außerhalb dessen die Anregungswahrscheinlichkeit steil abfällt, ist in verschiedenen Atom-Atom-Stoßexperimenten gefunden worden (128,129). Er unterscheidet sich um weniger als einen Faktor 2 vom Bohr'schen Radius $a_o$ (= o.o529 nm).

Die Wahrscheinlichkeit P eines Stoßes zwischen einem gestreuten $He^+$-Ion und einem bei der Bedeckung C (in Monolagen) adsorbierten Atom innerhalb eines Abstands $a_o$ ergibt sich aus dem Flächenverhältnis

$$P = C \cdot \frac{\pi \cdot a_o^2}{A \cdot \sin \langle \phi_{aus} \rangle} \quad , \qquad (8.9)$$

wobei A die Fläche der Einheitszelle in der Oberfläche ist (für die NiFe(11o)-Oberfläche: o.o885 $nm^2$). Der Mittelwert der Austrittswinkel $\langle \phi_{aus} \rangle$ wird der Computer-Simulation nach Abb. 8.3 entnommen. Bei großem Einschußwinkel (z.B. $\phi = 6^o$) ist dieser Mittelwert ebenfalls groß ($\langle \phi_{aus} \rangle = 23^o$). Deswegen ist die Wahrscheinlichkeit eines Stoßes zwischen einem $He^+$-Ion und einem bei einer Bedeckung von z.B. o.1 Monolage adsorbierten Atom mit P = o.o2 klein. Daher muß der experimentelle Wert S/I = o.8 überwiegend durch Anregung der $He^+$-Ionen in Wechselwirkung mit dem Elektronengas-Ausläufer (Abb.8.5 Weg c) entstanden sein. Mit diesem Wert als Maximalwert für S/I ergibt sich:

$$S/I = 0.8 \, ( \, 1 - P \, ) \qquad (8.1o)$$

Mit Gl. 8.9 und 8.1o wurde S/I als Funktion von $\phi$ berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 8.4 durch volle Linien für C = o.1 Monolage (adsorbiertes Restgas)und für C = 1/3 Monolage (adsorbierter Sauerstoff) eingezeichnet. Diese Abschätzung stimmt gut mit den gemessenen Werten für $\phi > 1^o$ überein. Bei großer Bedeckung C oder kleinen Austrittswinkeln $\phi_{aus}$ kann P in Gl. 8.9 größer als 1 werden. Das bedeutet, daß ein Projektil im Mittel durch mehr als ein adsorbiertes Atom innerhalb des kritischen Abstands $a_o$ trifft. In diesem Fall ist Gl. 8.10 nicht mehr gültig, da der letzte Stoß bei diesen Projektilen einen positiven Wert von S/I erzeugt (siehe Abb. 8.5, Weg d). Dementsprechend liegen die experimentellen Werte für S/I in Abb. 8.4 für kleine Winkel $\phi$ über der Abschätzung nach Gl. 8.1o.

### 8.2.6 S/I als Funktion des Streuwinkels

Durch die Stöße mit adsorbierten Atomen werden die He-Projektile nicht nur angeregt, sondern auch abgelenkt (Abb. 8.5). He-Ionen mit negativem S/I haben kleinere Austrittswinkel (nach einem Stoß unterhalb des Mittelpunkts des adsorbierten Atoms) als jene mit positivem S/I (nach einem Stoß oberhalb des Mittelpunkts). Zwischen $He^+$-Ionen mit verschiedenen Austrittswinkeln kann im Experiment durch vertikale Verschiebung des Nachweisbereiches unterschieden werden. Obwohl das Bild der optischen Blende, durch das der Nachweisbereich festgelegt wird, durch Justierfehler (Abs. 3.3.1) unscharf war, kann auf diese Weise der Nachweisbereich auf Teilchen mit großen oder kleinen Austrittswinkeln senkrecht zur Oberfläche eingeschränkt werden.

Die Ergebnisse eines solchen Experiments sind in Abb. 8.6a gezeigt. Die Computer-Simulation für diese Bedingungen (Abb. 8.6b) wird im nächsten Abschnitt besprochen. Die Lichtausbeute I und die Stokes-Parameter S/I, C/I und M/I sind als Funktion der vertikalen Position des Nachweisbereiches gemessen worden. Der Einfallswinkel der Ionen war $\phi = 1^o$, die Einschußenergie 2oo keV. Auf der Oberfläche war etwa o.1 Monolage Restgas adsorbiert. Die Position h des Nachweisbereichs wird im Maximum der Lichtausbeute als Null definiert. Bei diesem Experiment haben die meisten gestreuten Teilchen Austrittswinkel zwischen $1^o$ und $5^o$ (vergl. Abb. 8.3). Dies entspricht einer Veränderung von h um nur 1 mm, was klein im Vergleich zum vertikalen Maß (4.5 mm) des Nachweisbereiches ist. Deswegen enthält die Kurve der Lichtausbeute in Abb. 8.6 wesentlich auch das Empfindlichkeitsprofil des Nachweisbereichs, das aufgrund der Abbildungsunschärfe als Gauß-förmig angenommen wird.

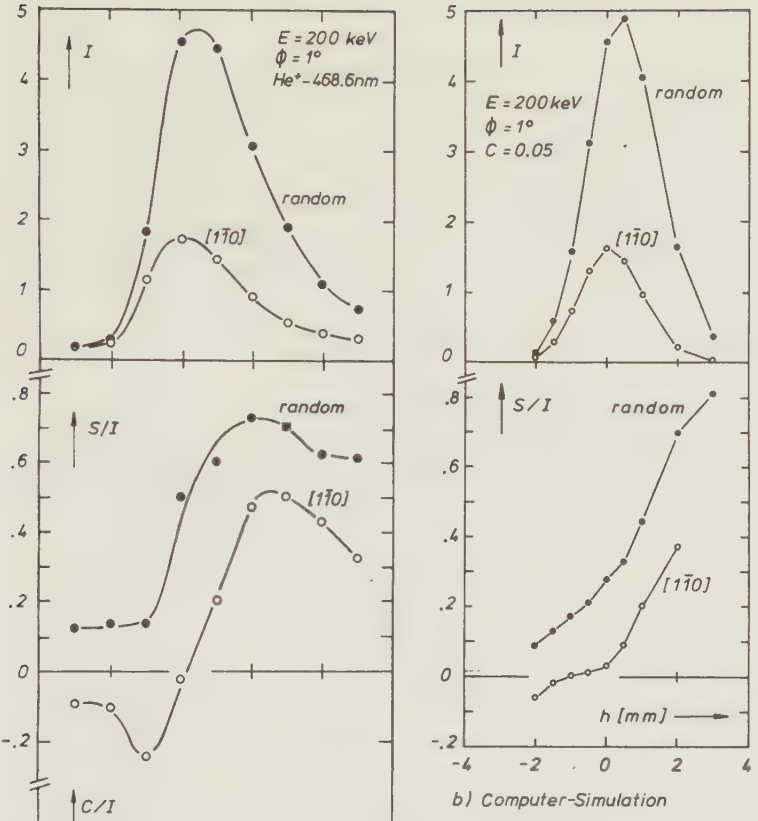



Abb. 8.6 :
Lichtausbeute I und Stokes - Parameter S/I, C/I und M/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung als Funktion der senkrechten Position h des Nachweisbereichs für Einschuß parallel und random zur [1$\bar{1}$0] - Richtung; Einschußenergie : 200 keV

Das Experiment ist bei zwei seitlichen Einschußwinkeln durchgeführt worden: (i) bei $\Theta = 11^{\circ}$ zur $[1\bar{1}o]$-Atomkette in der Oberfläche (random); die Ergebnisse sind die vollen Punkte in Abb. 8.6a; (ii) bei $\Theta = o^{\circ}$, d.h. bei axialer Gitterführung entlang der $[1\bar{1}o]$-Ketten; die Ergebnisse sind die offenen Kreise in Abb. 8.6 a. Im Fall (ii) liegt die Lichtausbeute bei allen Werten für h unter der von Fall (i). Dieser Rückgang der Lichtausbeute bei axialer Gitterführung wurde in Abs. 6.3 besprochen.

Bei hohen Positionen des Nachweisbereiches ($h \geq 1$ mm) werden $He^{+}$-Ionen mit großen Austrittswinkeln nachgewiesen, die bevorzugt durch Wechselwirkung mit der Metall-Oberfläche angeregt wurden. Ihre Zirkularpolarisation ist positiv, wie in Abs. 8.2.4 beschrieben. Bei niedrigeren Postionen des Nachweisbereiches nimmt die Lichtausbeute zu und erreicht ein Maximum bei h = O (per definitionem). Dabei nimmt die Anregung durch Stöße mit adsorbierten Atomen zu. Dementsprechend geht die Zirkularpolarisation nach Gl. 8.1o zurück. Wird der Nachweisbereich noch weiter nach unten verschoben (h = - 1mm), so nimmt S/I weiter ab und erreicht für $\Theta = o^{\circ}$ sogar ein negatives Vorzeichen. In diesem Fall werden bevorzugt Ionen beobachtet, die durch Stöße mit adsorbierten Restgasatomen nach unten abgelenkt wurden. Der Rückgang der Zirkularpolarisation bei Einschuß parallel zur $[1\bar{1}o]$-Richtung, Fall (ii), wird in Abs. 8.2.9 näher behandelt.

Während S/I starke Veränderungen zeigt, bleiben C/I und M/I nahezu gleich bei verschiedenen Austrittswinkeln.

Ähnliche Experimente sind für $He^{+}$-Ionen bei einer Einschußenergie von 7o keV durchgeführt worden. Der senkrechte Einschußwinkel war $\phi = 1.7^{\circ}$. Für diesen Winkel ist die Querenergie dieselbe wie im vorigen Experiment bei 2oo keV

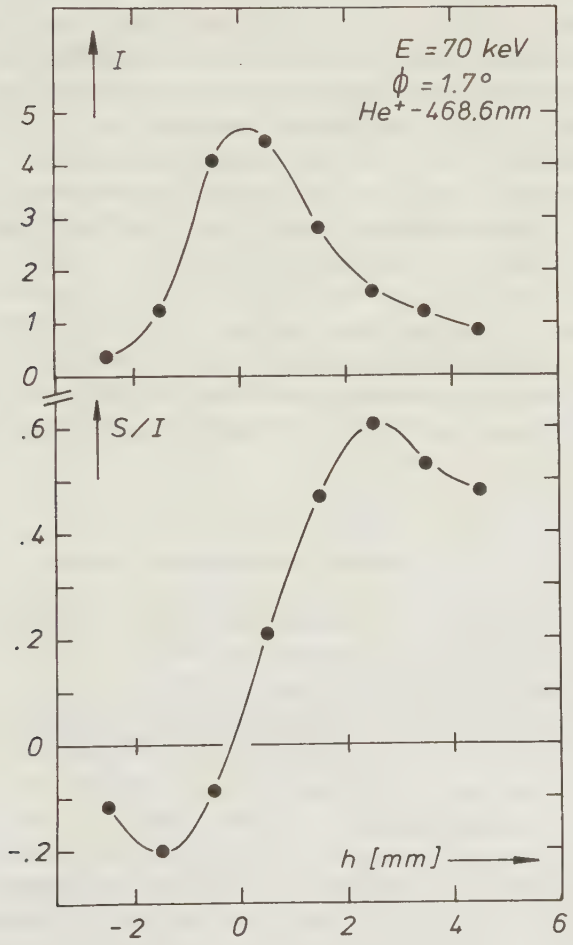



Abb. 8.7 : Lichtausbeute I und Zirkularpolarisation S/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung als Funktion der senkrechten Position h des Nachweisbereichs bei Einschuß random zur $[1\bar{1}0]$ - Richtung ; Einschußenergie : 70 keV

und $\phi = 1^{o}$. Der seitliche Winkel war $\theta = 11^{o}$ (random) zur [1$\bar{1}$o]-Richtung. In Abb. 8.7 ist die Lichtausbeute I und die Zirkularpolarisation S/I als Funktion der Höhe h des Nachweisbereichs dargestellt. Die Ergebnisse zeigen denselben Verlauf wie die Messungen bei 2oo keV. S/I erreicht jedoch negative Werte auch bei random-Einschuß, im Gegensatz zum Experiment bei 2oo keV. Dies ist auf die größeren Ablenkwinkel ($\vartheta \sim 1/E$, Abs. 5.3) der Ionen in Stößen mit adsorbierten Atomen zurückzuführen. Daher ist die Winkelaufstreuung dieser Teilchen bei 7o keV breiter als bei 2oo keV. Ionen mit kleinem Austrittswinkel und negativem Vorzeichen von S/I können deswegen durch den Nachweisbereich besser aufgelöst werden. Bei Einschuß unter $\theta = o^{o}$ und bei niedriger Position des Nachweisbereichs (h = −1 mm) wurden negative Werte bis S/I = -o.35 gemessen, wie Abb. 8.12 zeigt.

### 8.2.7 Computer-Simulation der Zirkularpolarisation

Die Vorstellung, daß die im Experiment beobachteten negativen Werte von S/I durch Anregung und Abwärts-Ablenkung an adsorbierten Atomen erzeugt werden, ist in einer Computer-Simulation geprüft worden. 2oo keV $He^{+}$-Ionen wurden unter einem Einschußwinkel $\phi = 1^{o}$ an einer (11o)-Ni-Oberfläche gestreut. In dieser Rechnung sind Aufwärts-Stufen mit einem Abstand von 5o Atomabständen berücksichtigt worden, entsprechend Abs. 6.3. Die Oberfläche wurde in der Simulation mit o.o5 Monolagen Sauerstoff bedeckt, stellvertretend für die wirkliche Restgas-Bedeckung, die i.a. aus komplizierteren Molekülen besteht. In der Simulation wird die Anregung an adsorbierten Atomen berücksichtigt, wie sie in Abs. 8.2.3 beschrieben wurde. Den durch Wechselwirkung mit dem Elektronengas angeregten Teilchen wird vereinfachend eine Zirkularpolarisation S/I = 1 zuge-

ordnet. Bei den Ionen, die ein adsorbiertes Atom innerhalb $r_c = a_o$ treffen, wurde die Abregung nach Abs. 8.2.3 unterdrückt. Nur der letzte Stoß mit einem Sauerstoffatom wurde für die Anregung und die Bestimmung der Polarisation S/I ausgewertet. Es wurde angenommen, daß das Licht nach dieser Anregung in der Streuebene vollständig zirkularpolarisiert ist. Der berechnete Wert $(S/I)_i$ für das i-te Teilchen ist dann die Projektion dieses Werts ($\pm$ 1) auf die Ebene senkrecht zur optischen Achse des Nachweis-Systems:

$$(S/I)_i = (\pm 1) \cdot 2 \cos^2 \alpha_i / (1 + \cos^2 \alpha_i) \qquad (8.11)$$

Darin ist $\alpha_i$ der Winkel zwischen der Normalen auf die Streuebene und der Beobachtungsrichtung. Das Vorzeichen in Gl. 8.11 hängt von der Art des Stoßes mit dem adsorbierten Atom ab und ist: + 1 für Stöße oberhalb des Mittelpunkts und - 1 für Stöße unterhalb des Mittelpunkts (vgl. Abb. 8.5). Der Beitrag jedes Ions zur gesamten Zirkularpolarisation wurde gewichtet nach

$$S/I = \frac{\sum_i (S/I)_i \cdot I_i}{\sum_i I_i} \quad ,$$

wobei $I_i$ der Beitrag des i-ten gestreuten $He^+$-Ions zur gesamten Lichtausbeute I ist, also

$$I = \sum_i I_i \quad .$$

Auf diese Weise wurde die Lichtausbeute I und die Zirkularpolarisation S/I der $He^+$-Ionen als Funktion des Austrittswinkels $\phi_{aus}$ berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 8.8 in Form eines Histogramms für zwei seitliche Einschußwinkel zur [1$\bar{1}$o]-Richtung in der Oberfläche gezeigt:

(i) $\Theta = 0^o$, (ii) $\Theta = 6^o$ (random)

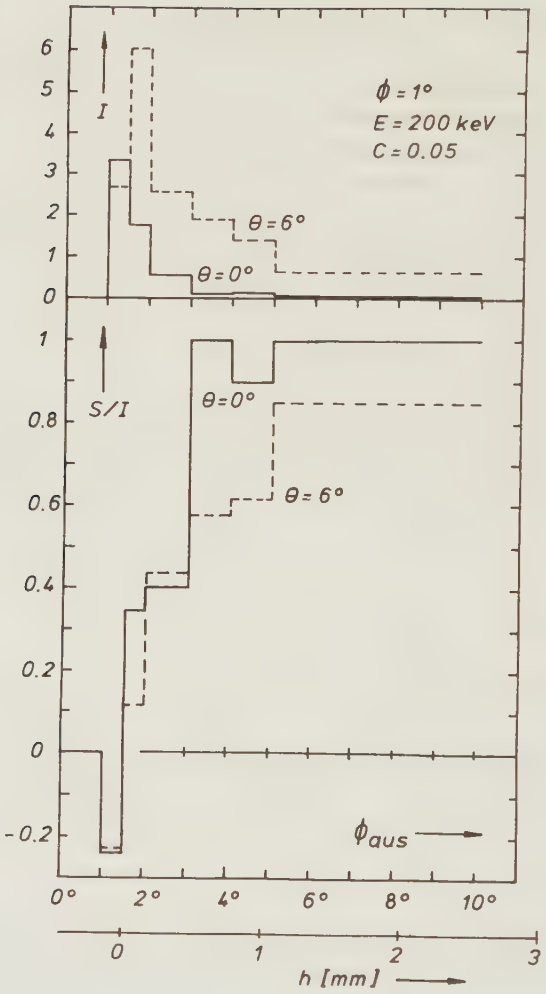



Abb. 8.8 : Computer - Simulation der Lichtausbeute I und der Zirkularpolarisation S/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung als Funktion des Austrittswinkels $\phi_{aus}$ für zwei seitliche Einschußwinkel θ zur $[1\bar{1}0]$ - Richtung ; Bedeckung der Oberfläche : C = 0.05 Ml

Negative Werte für S/I werden für Ionen erhalten, die mit $\phi_{aus} \leq 1.5^{o}$ durch Stöße mit adsorbierten Atomen nach unten abgelenkt werden, wie in Abb. 8.5, Weg b dargestellt ist. Doppelte Begegnungen mit adsorbierten Atomen (Abb. 8.5, Weg d), die ein positives Vorzeichen von S/I ergeben, sind bei der hier simulierten Bedeckung (C = o.o5) selten. Sie treten häufiger auf bei höheren Bedeckungen. Für $r_c = a_o =$ o.o529 nm werden etwa o.25 aller gestreuten Teilchen durch Stöße mit adsorbierten Atomen angeregt.

In Abb. 8.8 ist eine zusätzliche Achse eingezeichnet, für die der Austrittswinkel $\phi_{aus}$ umgerechnet wurde in die vertikale Position h des Nachweisbereichs (siehe Abs. 3.3.1; h wird in einer Entfernung von 18 mm hinter dem Mittelpunkt des Kristalls gemessen), wobei h = O wie im Experiment im Maximum der Lichtausbeute bei $\phi_{aus} = 1.5^{o}$ definiert wurde.

Die Ergebnisse von Abb. 8.8 wurden mit einem Gauß-förmigen Empfindlichkeitsprofil des Nachweisbereichs gefaltet (FWHM = 2mm), dessen Maximum sich in verschiedenen Höhen h befindet. Dies entspricht der Unschärfe des Nachweisbereichs im Experiment (Abs. 3.3.1). Die Ergebnisse dieser Faltung sind in Abb. 8.6b angegeben. Sie sind in Übereinstimmung mit dem Experiment, einschließlich negativer Werte für S/I bei niedrigen Positionen h für $\theta = o^{o}$.

Das wirkliche Empfindlichkeitsprofil des Nachweisbereichs kann in seinen Flanken einen steileren Abfall aufweisen, als das angenommene Gauß-förmige Profil. Dadurch würden die negativen Werte von S/I für $\phi_{aus} \leq 1.5^{o}$ in Abb. 8.8 noch deutlicher aufgelöst. Dies ist ein möglicher Grund für das experimentelle Minimum von S/I bei h = - 1mm und $\theta = o^{o}$.

### 8.2.8 S/I bei planarer Gitterführung

In der Lichtausbeute der 468.6 nm-Strahlung des $He^+$-Ions werden bei Einschuß parallel zu niedrig indizierten Ebenen und senkrechtem Einschußwinkel $\phi \gtrsim 2^o$ Minima gefunden, die in Abs. 6.4 diskutiert wurden. Für Einschuß bei $\phi = 3.5^o$ in die Ebenen, die von der [oo1]-Richtung in der Oberfläche ausgehen (vergl. Abb. 6.15c), sind die Lichtausbeute I und die Zirkularpolarisation S/I in Abb. 8.9 gezeigt. S/I nimmt ein Einschuß parallel zu den Ebenen nur wenig ab. Diese Abnahme wird nach Gl. 8.9 durch kleine Veränderungen des mittleren Austrittswinkels $\langle \phi_{aus} \rangle$ der gestreuten Teilchen verursacht. Die Abnahme von o.76 auf o.74 des mittleren S/I-Werts ist auf die zunehmende Restgasadsorption während des Experiments und die dabei auftretenden negativen S/I-Beiträge zurückzuführen (vergl. Abb. 8.1).

### 8.2.9 S/I bei axialer Gitterführung

Wesentlich stärkere Veränderungen von S/I als bei der planaren Gitterführung wurden bei der axialen Oberflächen-Gitterführung gefunden, die deswegen näher untersucht wurde . Die optische Blende wurde für diese Messungen waagrecht gestellt. Die Höhe wurde so justiert, daß die Lichtausbeute maximal war (h = O in Abb. 8.6). Dabei werden Teilchen mit Austrittswinkeln bis zu $1o^o$ nachgewiesen. Die Lichtausbeute I und die Stokes-Parameter S/I, C/I und M/I sind für 2oo keV-He-Projektile, die unter $\phi = 1^o$ und $[1\bar{1}o]$-Richtung einfallen, als Funktion des seitlichen Winkels $\Theta$ in Abb. 8.1o dargestellt. Die Minima in I und S/I sind auch in Abs. 6.3 bzw. Abs. 8.2.4 diskutiert worden. Das Minimum in S/I wird von der wachsenden Anzahl an $He^+$-Ionen verursacht, die durch adsorbierte Atome angeregt und dabei nach unten abgelenkt werden. Die Ursache dafür liegt in

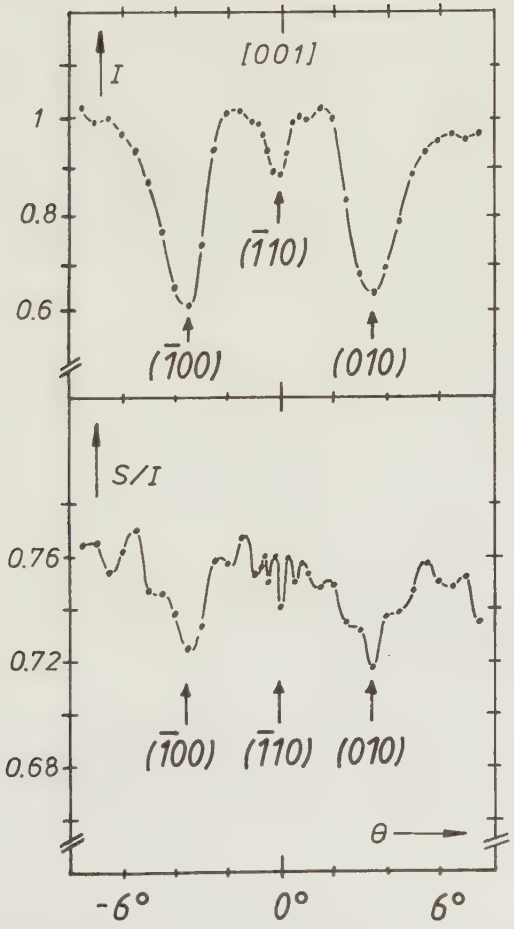



Abb. 8.9 : Lichtausbeute I und Zirkularpolarisation S/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung bei planarer Gitterführung ; 200 keV He - Ionen wurden unter $\phi = 3.5^{\circ}$ in der Umgebung der [001] - Richtung eingeschossen

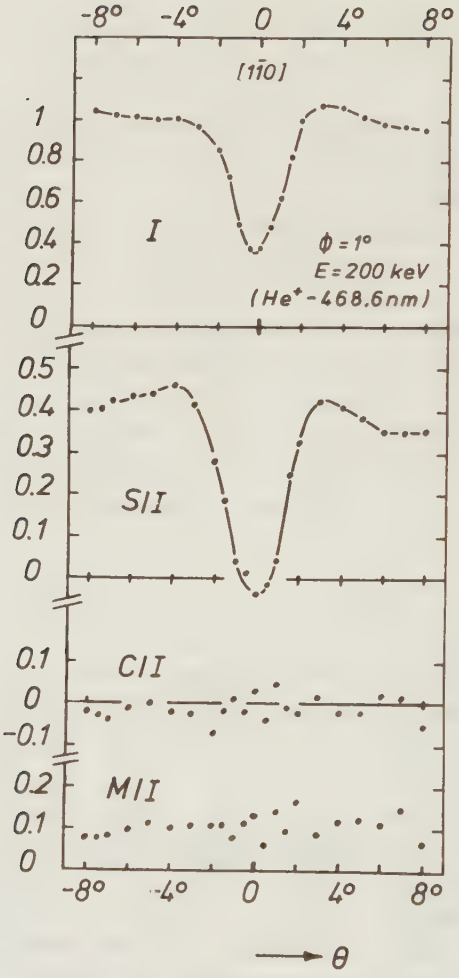



Abb. 8.10 : Lichtausbeute I und Stokes - Parameter S/I, C/I und M/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung bei axialer Oberflächen - Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$0] - Richtung ; Einschußenergie : 200 keV

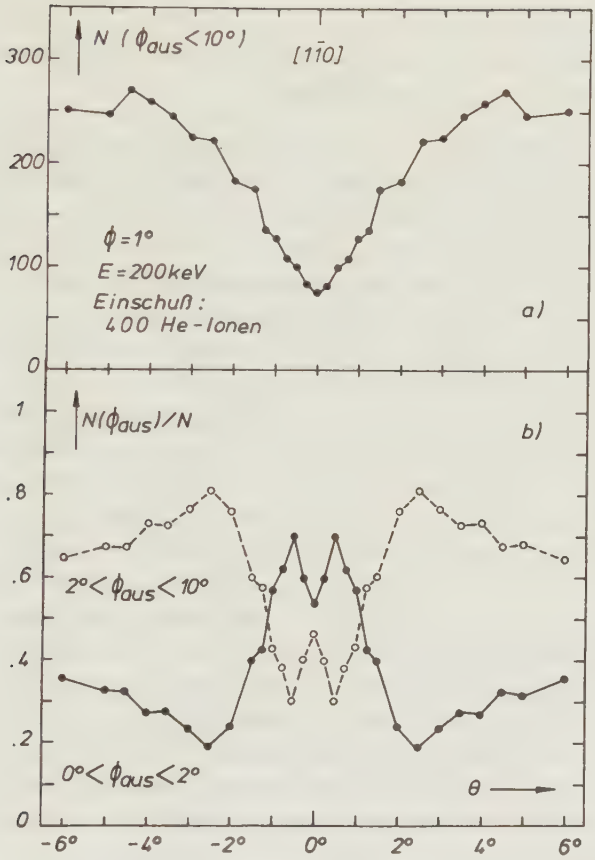



Abb. 8.11 : Computer - Simulation der axialen Oberflächen - Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$0] - Richtung bei einer gestuften Oberfläche mit Stufenabstand 12.5 nm ;

a) Anzahl der gestreuten Teilchen mit Austrittswinkeln $\phi_{aus} < 10^{o}$ ;

b) Anzahl der Teilchen, die in zwei verschiedene Bereiche des Austrittswinkels gestreut wurden, geteilt durch die Gesamtzahl getreuter Teilchen N aus a)

der Verschiebung des mittleren Austrittswinkels bei axialer Gitterführung zu kleineren Werten.

Dies wird in Abb. 8.11 anhand der Computer-Simulation gezeigt. Für diese Rechnung wurde eine Oberfläche mit Aufwärtsstufen bei einem Abstand von 5o Atomabständen simuliert. Der senkrechte Einschußwinkel war $\phi = 1^{o}$. Die Anzahl N (Abb. 8.11a) der in den Nachweisbereich gestreuten Teilchen durchläuft ein Minimum bei Einschuß parallel zur $[1\bar{1}o]$-Kette. Durch diese Zahl wird der Verlauf der Lichtausbeute in Abb. 8.1o bestimmt. Die Verteilung der gestreuten Teilchen auf zwei verschiedene Bereiche des Austrittswinkels $\phi_{aus}$ ist in Abb. 8.11b gezeigt. Dabei ist die Anzahl der in den jeweiligen Bereich gestreuten Teilchen durch die Gesamtzahl N der gestreuten Teilchen dividiert. Die relative Zahl von Teilchen mit Austrittswinkeln kleiner als $2^{o}$ nimmt stark zu bei Einschuß parallel zu der $[1\bar{1}o]$-Richtung. Dieses Verhalten ist bei einer ungestuften Oberfläche noch deutlicher ausgeprägt. Andererseits nimmt die relative Anzahl der Teilchen mit Austrittswinkeln zwischen $2^{o}$ und $1o^{o}$ stark ab. Daher sind Stöße mit adsorbierten Atomen bei axialer Gitterführung wahrscheinlicher als bei random-Einschuß. Für $\Theta > 3^{o}$ nimmt die relative Anzahl der Teilchen mit $\phi_{aus} < 2^{o}$ wieder zu, da Spiegelreflexion an der Oberfläche möglich wird.

Ein Experiment entsprechend dem von Abb. 8.1o ist bei einer Energie von 7o keV und einem senkrechten Einschußwinkel $\phi=1.7^{o}$ durchgeführt worden (Abb.8.12), um den Einfluß von Oberflächenstufen zu reduzieren (vergl. Abs. 6.3). Die Lichtausbeute zeigt das Fokussierungsmaximum bei $\Theta = o^{o}$ (vergl. Abb.6.14). S/I hängt vom seitlichen Einschußwinkel $\Theta$ ähnlich wie bei dem 2oo keV-Experiment ab, ist jedoch zu negativen Werten verschoben, da der Nachweisbereich tiefer eingestellt war ($h < 0$).

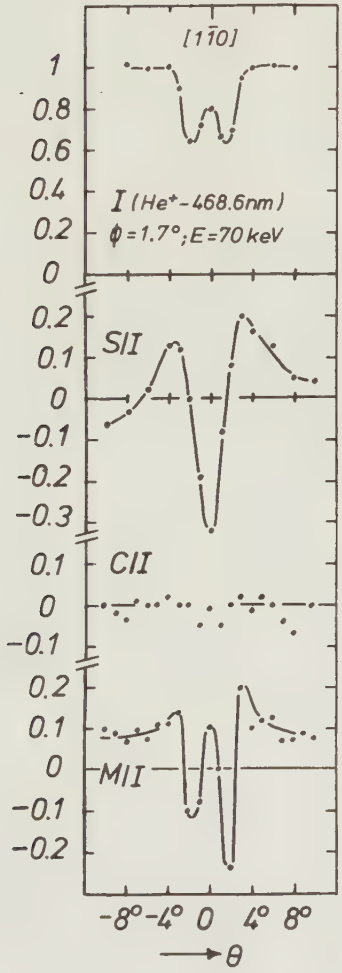



Abb. 8.12 : Lichtausbeute I und Stokes - Parameter S/I, C/I und M/I der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung bei axialer Oberflächen - Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$0] - Richtung ; Einschußenergie : 70 keV

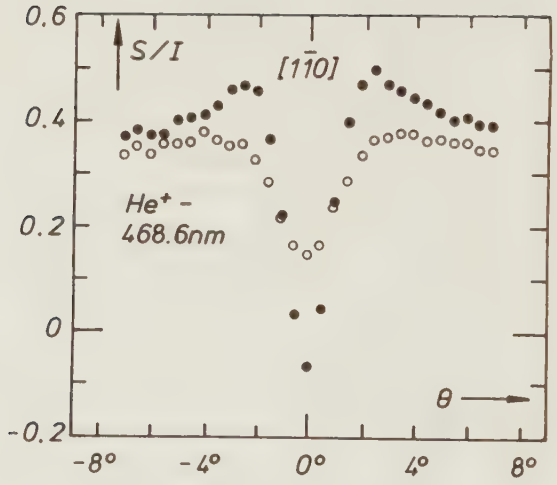



Abb. 8.13 : Zirkularpolarisation der $He^+$ - 468.6 nm - Strahlung bei der axialen Oberflächen - Gitterführung bei reiner Oberfläche ( Punkte ) und bei einer Sauerstoff - Bedeckung von 1/3 Monolage ( Kreise )

Die lineare Polarisation C/I bleibt konstant gleich Null, wie im 2oo keV-Experiment von Abb. 8.1o. Im Gegensatz dazu zeigt die lineare Polarisation M/I im 7o keV-Experiment eine starke Abhängigkeit von $\Theta$. Dieser Effekt scheint mit dem Auftreten des Fokussierungs-Maximums verknüpft zu sein. Für seine Erklärung sind jedoch weitere Untersuchungen nötig.

Das Modell der Anregung durch adsorbierte Atome wird durch das folgende Experiment weiter unterstützt: In Abb. 8.13 sind Messungen von S/I nach Streuung von 2oo keV $He^+$-Ionen ($\phi = 1^o$) an einer sauberen Oberfläche bzw. an einer Oberfläche, die von 1/3 Monolage Sauerstoff bedeckt war, gezeigt. Durch die Bedeckung mit Sauerstoff nimmt S/I für $\Theta > 4^o$ (random-Einschuß) ab. Die Gründe für diese Abnahme sind in Abs. 8.2.4 und 8.2.5 diskutiert worden. Dagegen nimmt S/I bei $\Theta = o^o$ zu. Diese Zunahme ergibt sich aus der höheren Wahrscheinlichkeit für das Durchdringen mehrerer Sauerstoffatome (Abb. 8.5, Weg d) durch die kleineren Austrittswinkel bei axialer Gitterführung (vergl. Abb. 8.11b).

## 8.3 ERGEBNISSE FÜR DEN $HE^o$-587.6 nm-ÜBERGANG

### 8.3.1 Axiale Gitterführung

Gleichartige Experimente zur axialen Gitterführung wie in den vorigen Abschnitten sind auch bei Beobachtung der 587.6 nm-Strahlung des $He^o$-Atoms durchgeführt worden. Die Lichtausbeute I und die Zirkularpolarisation S/I wurden bei 2oo keV Einschußenergie und einem senkrechten Einschußwinkel $\phi = 1^o$ als Funktion des seitlichen Einschußwinkels $\Theta$ um die $[1\bar{1}o]$-Richtung gemessen. Die Ergebnisse sind in Abb. 8.14 gezeigt. Sie unterscheiden

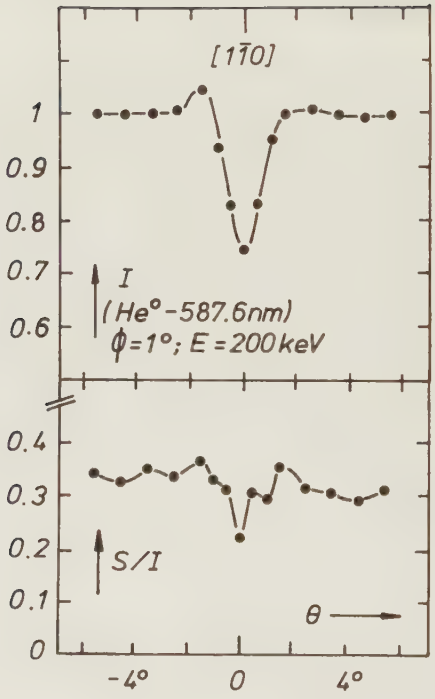



Abb. 8.14 : Lichtausbeute I und Zirkularpolarisation S/I der $He^{o}$ - 587.6 nm - Strahlung bei axialer Oberflächen - Gitterführung entlang der [1$\bar{1}$0] - Richtung

sich dadurch von den Ergebnissen für die $He^+$-468.6 nm-Strahlung (Abb. 8.1o), daß die Minima sowohl in der Lichtausbeute als auch in der Zirkularpolarisation weniger tief sind. In Abs. 8.2.1 wurde beschrieben, daß die Zirkularpolarisation der $He^o$-587.6 nm-Strahlung für $\phi = 5^o$ bei Sauerstoffbedeckung um denselben Betrag abnimmt, wie bei der 468.6 nm-Strahlung. Es wird deswegen angenommen, daß die Anregung an adsorbierten Atomen in derselben Weise wirksam ist. Wie in Abs. 8.2.3 abgeschätzt wurde, ist jedoch der Abregungsmechanismus, der auf den $He^o$-587.6 nm-Übergang wirkt, nicht vernachlässigbar. Das bedeutet, daß Teilchen mit kleinen Austrittswinkeln die überwiegend durch Stöße mit adsorbierten Atomen angeregt werden, einen verringerten Beitrag zur Lichtausbeute liefern. Für Teilchen, die ein adsorbiertes Atom von unten durchdringen und dabei nach Abb. 8.5 mit $S/I < O$ angeregt werden, ist dabei die Abregung noch stärker wirksam, als für Teilchen, die ein solches Atom von oben durchdringen ($S/I > O$). Dies hat zwei Gründe:

1. Durch die Ablenkung beim Stoß mit dem absorbierten Atom haben diese Teilchen kleinere Austrittswinkel. Daher ist auch $v_\perp$ in Gl. 8.7 kleiner.

2. Da die Anregung bei Durchdringen des adsorbierten Atoms von unten in einer geringeren Höhe $s_o'$ erfolgt, als bei Durchdringen von oben, ist $v_c'$ in Gl. 8.9 größer.

Beide Gründe führen zu einem geringen Beitrag der Teilchen mit $S/I < O$ zur gesamten Lichtausbeute. Ein Beispiel soll diese Aussagen verdeutlichen : 2 He-Teilchen der Energie 2oo keV treten unter $2^o$ aus der Oberfläche aus und durchdringen ein adsorbiertes Sauerstoffatom ($h$ = o.125 nm) in o.15 nm (Teilchen 1) bzw. o.1 nm Höhe (Teilchen 2). Die Überlebenswahrscheinlichkeiten für den angeregten $He^o$-Zustand sind nach Abs. 8.2.3: o.63 für

Teilchen 1, aber nur o.o7 für Teilchen 2. Daher ist das Minimum von S/I bei der $He^{o}$-Strahlung weniger ausgeprägt als bei der $He^{+}$-Strahlung.

### 8.3.2 Planare Gitterführung

2oo keV-$He^{+}$-Ionen wurden und $\phi = 5^{o}$ auf die (11o)-NiFe-Oberfläche eingeschossen. Der seitliche Winkel $\Theta$ wurde dabei um die [1$\bar{1}$2]-Richtung in der Oberfläche variiert. Dabei entsteht durch planare Gitterführung ein Minimum sowohl in der $He^{+}$-468.6 nm-Strahlung als auch im Targetstrom. Dies wurde in Abs. 6.4 bzw. 6.7 besprochen. Für die Beobachtung der $He^{o}$-587.6 nm-Strahlung war die optische Blende (Nachweisbereich) senkrecht gestellt, so daß Teilchen mit Austrittswinkeln bis zu $6o^{o}$ erfaßt werden. Bei planarer Gitterführung sinkt die Anzahl aller gestreuten Teilchen, wie die Computer-Simulation (Kurve a in Abb. 8.15) zeigt. Im Gegensatz dazu zeigt das Experiment ein flaches, doppeltes Maximum um die [1$\bar{1}$2]-Gitterrichtung (Abb. 8.16, volle Punkte). Diese Struktur wird in der Computer-Simulation nur in der Anzahl der mit $\phi_{aus} \geq 2o^{o}$ gestreuten Teilchen gefunden (Abb. 8.15, Kurve c). Wird die Lichtausbeute aller gestreuten Teilchen mit einer Überlebenswahrscheinlichkeit nach Gl. 8.3 bzw. 5.44 mit $v_c = 1.2 \cdot 1o^{8}$ cm/s gewichtet, so ergibt sich die gestrichelte Kurve in Abb. 8.16. Diese Kurve hat bis auf statistische Schwankungen einen ähnlichen Verlauf wie die experimentelle Kurve. Insbesondere verschwindet das tiefe Minimum in der Lichtausbeute. Der Abregungsmechanismus "löscht" also die Lichtemission der unter weniger als etwa $2o^{o}$ austretenden Teilchen (vergl. Abb. 5.8).

Der in der Simulation in Abb. 8.16 verwendete Wert $v_c = 1.2 \cdot 1o^{8}$ cm/s wurde in Abs. 5.9 aus der Lichtausbeute

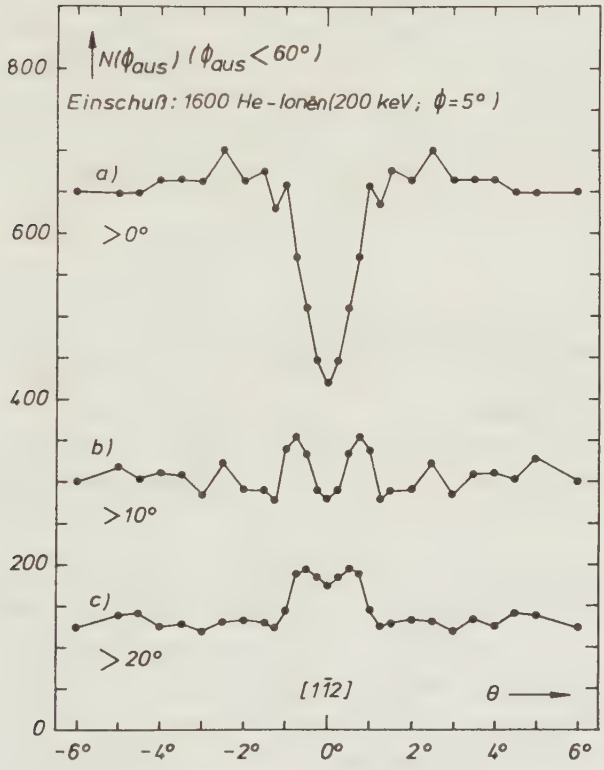



Abb. 8.15 : Computer - Simulation der planaren Gitterführung durch die ($\bar{1}$11) - Ebenen bei Einschuß um die [1$\bar{1}$2] - Richtung :

a) Gesamtzahl der gestreuten Teilchen mit $0^{\circ} < \phi_{aus} < 60^{\circ}$ ;

b) Anzahl der gestreuten Teilchen mit $10^{\circ} < \phi_{aus} < 60^{\circ}$ ;

c) Anzahl der gestreuten Teilchen mit $20^{\circ} < \phi_{aus} < 60^{\circ}$

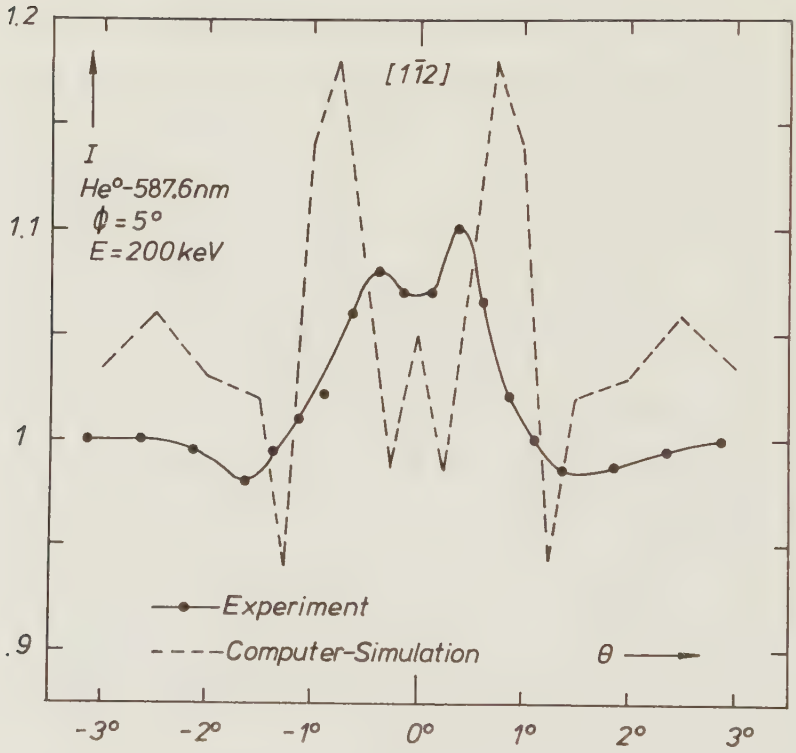



Abb. 8.16 : Lichtausbeute I der $He^{\circ}$ - 587.6 nm - Strahlung bei planarer Gitterführung durch die ($\bar{1}$11) - Ebenen bei Einschuß um die [1$\bar{1}$2] - Richtung ;
Experiment : durchgezogene Linie
Computer - Simulation : gestrichelte Linie

des $He^{o}$-Übergangs nach senkrechtem Durchtritt durch Kohlenstoff-Folien hergeleitet. Das Modell eines Abregungsmechanismus nach Gl. 8.7 erklärt damit sowohl die Abhängigkeit der Lichtemission vom Austrittswinkel im Experiment nach Abb. 8.16 als auch die Geschwindigkeitsabhängigkeit beim senkrechten Austritt im Transmissionsexperiment nach Abs.5.11

## 8.4 DISKUSSION ANDERER MODELLE ZUR BESCHREIBUNG VON VERÄNDERUNGEN DER ZIRKULARPOLARISATION

In den vorhergehenden Abschnitten sind die experimentellen Ergebnisse auf der Grundlage zweier Anregungsmechanismen diskutiert worden:

1. Teilchen, die an einer reinen Oberfläche gestreut werden, werden nach dem Modell von Schröder und Kupfer (123) anisotrop angeregt.
2. Teilchen, die ein adsorbiertes Atom innerhalb eines Radius $a_o$ (Bohr'scher Radius) treffen, werden durch diesen Stoß angeregt. Das Vorzeichen der Zirkularpolarisation S/I nach dieser Anregung hängt davon ab, ob das adsorbierte Atom von oben oder von unten durchdrungen wurde.

Die Veränderungen von S/I wurden durch eine unterschiedliche Gewichtung zwischen diesen Anregungsmechanismen erklärt. Diese Verschiebung wird hervorgerufen, wenn sich der mittlere Austrittswinkel der gestreuten Teilchen als Funktion der Einschußwinkel $\Theta$ oder $\phi$ ändert.

Im folgenden werden andere Modelle betrachtet, die einen Einfluß auf die Stokes-Parameter S/I, C/I und M/I haben können:

Kupfer et al. (13o) haben die Auswirkung einer resonanten, kohärenten Anregung (Okorokov-Effekt) auf die Polarisation spiegelnd reflektierter, Wasserstoff-artigen Projektile berechnet. Aus der Ähnlichkeit der experimentellen Ergebnisse bei verschiedenen Geschwindigkeiten (entsprechend Energien von 7o bis 2oo keV) kann geschlossen werden, daß eine solche resonante Anregung bei den hier beschriebenen Versuchen keinen entscheidenden Einfluß gehabt hat.

Die quantenmechanische Phasenentwicklung, die durch den Stark-Effekt im elektrischen Feld der Oberfläche verursacht wird, ist ein weiteres Modell, nach dem Veränderungen in den Polarisationszuständen als Funktion der Austrittsparameter erwartet werden können (115). Vor allem in Wasserstoff- artigen Ionen wie $He^+$ führt die Stark-Aufspaltung der Feinstruktur-Niveaus zu einer Phasenentwicklung zwischen den Übergangswahrscheinlichkeiten dieser Niveaus, die von der Stärke des elektrischen Felds und von der Zeit abhängt, in der sich das Ion in diesem Feld befindet. Diese Zeit ist proportional zu $(\sin \phi_{aus})^{-1}$. Das bedeutet, daß S/I bei diesem Mechanismus dieselbe Abhängigkeit von $\phi_{aus}$ aufweist wie nach Gl. 8.9 bei Anregung an adsorbierten Atomen. Die Veränderung der anfänglichen Phasenbeziehung sollte jedoch in den beiden Stokes-Parametern S/I und C/I beobachtbar sein, wobei C/I von Null verschieden wäre (115). In den hier beschriebenen Experimenten war C/I jedoch in allen Fällen gleich Null, während sich S/I stark veränderte. Weiterhin wäre es zufällig, wenn die Wirkung des Stark-Effekts auch quantitativ dieselbe Abhängigkeit vom Austrittswinkel $\phi_{aus}$ ergeben würde, wie

die in Abs. 8.2.5 beschriebene Anregung durch Stöße mit adsorbierten Atomen. Die Wirkung des Stark-Effekts wird quantitativ hier nicht abgeschätzt, da in der Literatur sowohl über die Größe als auch die Ursache des elektrischen Felds noch kontrovers diskutiert wird (131, 132).

Während ein elektrisches Feld die Zirkularpolarisation des $He^+$-Ions stark verändern kann, ist sein Einfluß auf das $He^o$-Atom kleiner (115, 116, 118). Daher sollte nach diesem Modell die Veränderung von S/I mit den Austrittsparametern (als Funktion der Einschußparameter) beim $He^o$-Atom weniger ausgeprägt sein. Dies wird im Experiment von Abb. 8.14 tatsächlich beobachtet. Dieses Ergebnis wird jedoch auch durch die stärkere Abregung des $He^o$-587.6 nm-Übergangs qualitativ erklärt.

Schließlich ist ein weiterer Effekt denkbar, der negative Werte von S/I verstärken kann. Es ist möglich, daß der Abregungsmechanismus ungleich stark auf Unterniveaus wirksam ist, von denen Strahlung mit unterschiedlichen Vorzeichen des Drehimpulses ausgesendet wird. Darin würde sich dieselbe Anisotropie der Wechselwirkung des Teilchens mit der Oberfläche auswirken, die bereits zum Auftreten der Zirkularpolarisation führt. Dieser Effekt würde die beobachteten S/I-Werte zu negativen Werten hin verschieben. Dies gilt besonders für kleine Austrittswinkel, bei denen die Anregung an adsorbierten Atomen überwiegt. Aufgrund der hier beschriebenen Experimente kann jedoch nicht entschieden werden, ob ein solcher Unterschied in der Abregung tatsächlich existiert.

# 9. DAS COMPUTER-PROGRAMM UND SEINE BEDIENUNG

## 9.1 EINGABE-DATEN

Im Programm wird als Längeneinheit 1 Å = o.1 nm verwendet. Zu Beginn einer Simulation werden durch ein getrenntes Steuerprogramm Anfangsdaten und 1o Steuerparameter (NP1 bis NP1o) eingegeben. Die Anfangsdaten sind:

- die Einschußwinkel W und WEINZ, deren Bedeutung durch die Steuerparameter NP9 und NP3 festgelegt wird (Eingabe in Grad);
- die Unterteilung des Eingabe-Rasterfelds M, N; die Anzahl der gestarteten Teilchen ist M·N pro Einschußwinkel, falls nicht die Spur eines Teilchens (NP3 = 2) berechnet wird; meistens wurde für die Simulation M = N = 2o verwendet;
- die Rasterkoordinaten IA, JA, die die Anfangskoordinaten eines Ions innerhalb des Rasterfelds M, N festgelegen, falls die Spur eines Teilchens berechnet wird (NP3 = 2);
- der Stufenabstand NK für Aufwärts-, Abwärts- und alternierende Stufen, gemessen im Abstand der Streuebenen; z.B.
  NK = 1oo bei $[1\bar{1}o]$-Richtung:
  Stufenabstand = 1oo·1.25 Å = 125 Å
  NK = 1oo bei $[1\bar{1}2]$-Richtung:
  Stufenabstand = 1oo·4.33 Å = 433 Å
- die Einschußenergie EKEV in keV;

- die Höhe H der Sauerstoffatome über der ersten Substrat-Atomlage ( in Å)
- die absolute Temperatur T in K; wegen der Hochtemperatur-Näherung für die Debye-Funktion (Abs. 5.4.1) muß gelten: $T \geq 2oo$ K; bei Eingabe T = O. wird mit starrem Gitter gerechnet;
- der Nachweiswinkel PYRDET: Teilchen mit Austrittswinkel senkrecht zur Oberfläche bis zu diesem Wert werden in den Spektren der Energieverteilung und der Eindringtiefe berücksichtigt.

Die Steuerparameter NP1 bis NP1O haben folgende Bedeutung:

NP1 Energieverlust:
O Stoßparameter-unabhängig (Abs. 5.5.1)
1 " -abhängig (Abs. 5.5.3 und 5.5.4)

NP2 Sauerstoffbedeckung:
OO kein Sauerstoff
O1 1 Monolage
O2 1/2 Monolage usw.

NP3 Datenausgabe:
O nur das Gesamtergebnis
1 zusätzlich Einzelergebnisse für jedes Projektil
2 Spur eines Teilchens; dabei ist das Abarbeiten einer Winkelschleife nicht möglich, NP7 wird ignoriert;
W = $\phi$, WEINZ = $\Theta$

NP4 Einschußrichtung: O [oo1]
1 $[1\bar{1}o]$
2 $[1\bar{1}2]$

NP5 Sauerstoff-Position, gesehen in der Projektion senkrecht zur Einschußrichtung:
O Brücke, zwischen zwei Ketten
1 über den Ketten
2 Rekonstruktion ("missing row"-Modell); nur für NP4 = O oder 1;

NP6 Stufen mit Abstand NK:
- 0 ohne Stufen
- 1 aufwärts
- 2 abwärts
- 3 alternierend

NP 7 Winkel-Schleife; die durch NP9 bestimmte Winkelschreife ...
- 0 wird nur für $\phi$=WEINZ (NP9 = 1) bzw. $\Theta$ = WEINZ (NP9 = 2) berechnet;
- 1 wird abgearbeitet;
- 2 wird rückwärts abgearbeitet;

NP 8 Flußdichteverteilung:
- 0 wird nicht ausgedruckt
- 1 wird ausgedruckt

NP 9 $\Theta$- oder $\phi$-Winkelschleife: Die Simulation wird mit einem jeweils vorgegebenen Satz von 15 Einschußwinkeln durchgeführt; einer dieser Winkel wird variiert, der andere bleibt konstant:
- 0 $\phi$ wird variiert; $\Theta$=random (Stoßkoordinaten in Y-Richtung werden durch einen Zufallsgenerator erzeugt)
- 1 $\phi$ wird variiert; $\Theta$ = W
- 2 $\Theta$ wird variiert; $\phi$ = W

NP1o Abspeichern von Enddaten eines Teilchens in der Datei R:
- 0 nicht abspeichern
- 1 abspeichern

## 9.2 AUSGABE-DATEN

Folgende Ergebnisse einer Rechnung werden in jedem Fall ausgedruckt:

- Die Anzahl NACHWB der in den Nachweisbereich gestreuten Teilchen ($\phi_{aus} <$ PYRDET),
- die Anzahl NPXR und NPYR der nach Großweinkelstößen abgebrochenen Teilchenbahnen;
- die Anzahl NGW der Teilchen, die nach Austritt aus der Oberfläche nicht in den Nachweisbereich gelangen;
- die Anzahl NEX der Teilchenbahnen, die nach Großwinkelstößen die Oberfläche noch erreichen können und deren Bahn deswegen extrapoliert wurde;
- die Anzahl NYMAX der Teilchen, deren Bahnberechnung abgebrochen wurde, nachdem sie sich um YMAX von der Oberfläche entfernt haben;
- die mittlere Anzahl NMD der Stöße eines Teilchens, gemittelt über alle eingeschossenen Teilchen; daraus kann die Bahnlänge berechnet werden;
- das relative Maß für den Targetstrom TARG;
- die mittlere Austrittsenergie EMEAN der in den Nachweisbereich gestreuten Teilchen;
- die Rechenzeit.

Weiter werden folgende 9 Größen als Funktion des maximalen Austrittswinkels ($1^{o}$ bis $6o^{o}$ in 12 Schritten) ausgedruckt:

- die Anzahl der nachgewiesenen Teilchen NDET;
- ein Maß YPLG für den Strom der geladenen $He^{+}$-Ionen; YPLG = 1 bedeutet, daß alle eingeschossenen Ionen als Ionen in den jeweiligen Winkelbereich bestreut wurden;
- ein Maß YNTG für den Strom der neutralen $He^{o}$-Atome;

YNTG = 1 bedeutet, daß alle eingeschossenen Ionen als Neutralteilchen in den jeweiligen Winkelbereich gestreut wurden;

- die Lichtausbeuten HEPLO der $He^+$-Ionen nach Gl. 5.42 und HENTO der $He^o$-Atome nach Gl. 5.45. Diese Größen werden mit den Lichtanregungswahrscheinlichkeiten bei senkrechtem Austritt aus Kohlenstoff-Folien berechnet; daher wird die Abhängigkeit der Abregung vom Austrittswinkel nicht berücksichtigt; diese Größen sind so normiert, daß sie gleich 1 sind, wenn alle eingeschossenen Teilchen im entsprechenden Ladungszustand mit einer Energie von 2oo keV in den jeweiligen Winkelbereich gestreut werden;
- die Lichtausbeuten HEPLA ($He^+$-Ionen) und HENTA ($He^o$-Atome) bei Berücksichtigung von austrittswinkelabhängiger Abregung bzw. deren Aufhebung nach Anregung an adsorbiertem Sauerstoff;
- die Zirkularpolarisation S/I und Linearpolarisation M/I für das Licht der Ionen (Abs. 8.2.7).

Die Anzahl der gesteuten Teilchen wird als Funktion des Austrittswinkels $\phi_{aus}$ in 1o Intervallen zu je $1^o$ ($0$-$1o^o$) und in 12 Intervallen zu je $5^o$ ($0$-$6o^o$) dargestellt.

Die Energieverteilung der in den Nachweisbereich ($\phi_{aus} \leq$ PYRDET) gestreuten Teilchen wird in 1o Intervallen von 0 bis zur Einschußenergie dargestellt.

Durch Faltung mit einem Satz vorgegebener Lichtanregungswahrscheinlichkeiten (14) werden Lichtausbeuten für $He^+$ und $He^o$ berechnet.

Die Verteilung der Eindringtiefen der nachweisbaren Teilchen ($\phi_{aus} \leq$ PYRDET) wird in 2 Tabellen mit je 1o Intervallen für Eindringtiefen bis zu 1o bzw. bis zu 1oo Atom-

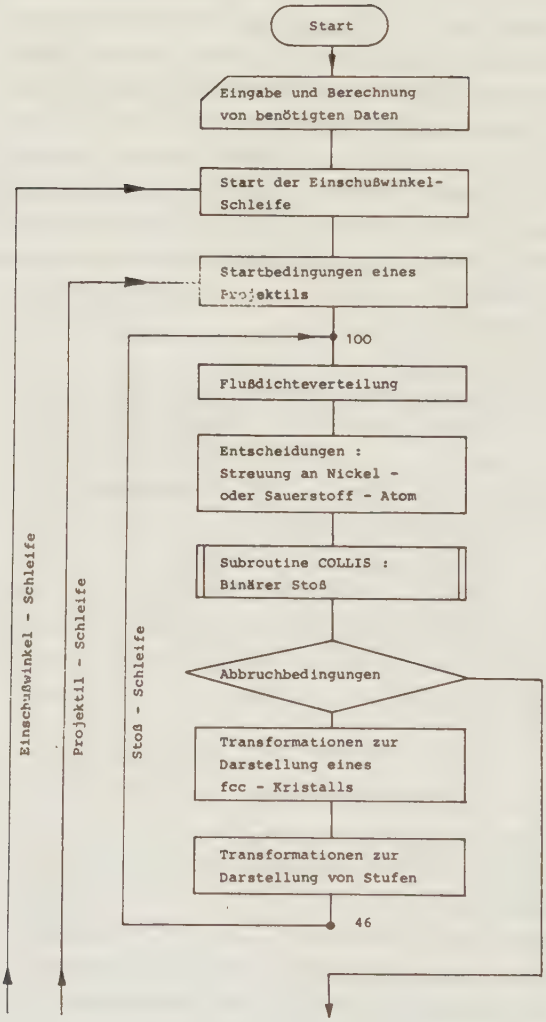
ebenen angegeben. Es wird dabei jeweils die tiefste Atomebene gewertet, die nicht durchdrungen wird.

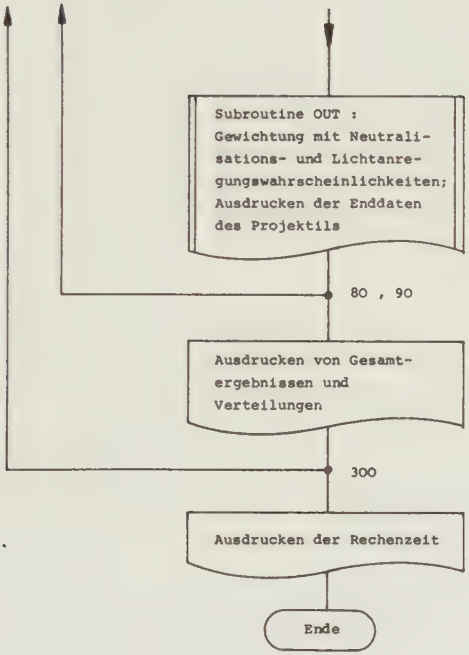
Ein Ausdrucken der Enddaten jeder Teilchenbahn ist durch NP3 = 1 möglich. Dies ist für Testzwecke für eine beschränkte Anzahl von Teilchen vorgesehen. Angegeben werden dabei: Anfangs- und Endkoordinaten; Austrittswinkel und -energie; Eindringtiefe; Beitrag zum Targetstrom; Anzahl der Stöße; Parameter, die über die Gründe des Abbruchs einer Bahnberechnung bzw. über die Art der Lichtanregung Auskunft geben. Bei der Berechnung der Spur eines einzelnen Teilchens (NP3 = 3) werden die Bahndaten nach jedem Stoß ausgedruckt. Dabei werden auch Angaben über Art und thermische Auslenkung des jeweiligen Stoßpartners gemacht.

Falls NP8 = 1 ist, wird die Flußdichteverteilung für die jeweiligen Einschußwinkel ausgedruckt. Diese Verteilung ist normiert auf die Flußdichte der einfallenden Ionen. Daher ergibt sich bei Spiegelreflexion an einer Oberfläche der Wert 2. Die Verteilung wird in einem Raster aus 2o x 31 Werten angegeben, das senkrecht zur Oberfläche von Y= +2.5 Å bis Y=−1.25 Å (2. Atomebene) reicht und parallel zur Oberfläche, bei allen Einschußrichtungen, von einer Atomkette bis hin zu dem Rasterelement vor der benachbarten Atomkette. Die Flußdichte ist invariant in Z = Richtung (Einschußrichtung).

Die Teilchen-Enddaten können durch NP1o = 1 in der Datei R abgespeichert werden. Von dort können sie durch ein getrenntes Auswert-Programm abgerufen werden. Dadurch kann bei kurzer Rechenzeit der Einfluß z.B. von verschiedenen Lichtanregungsmechanismen untersucht werden. In diesem Auswertprogramm wird auch der Zerfall der angeregten Zustände während der Flugzeit zu und im Nachweisbereich berücksichtigt. Die Lebensdauer für den $He^{+}$-468.6 nm-Übergang ist $2.o9 \cdot 1o^{-9}$s, für den $He^{o}$-587.6 nm-Übergang $1.55 \cdot 1o^{-8}$s. Weitere Korrekturen für die reduzierte Transmission der Interferenzfilter für Doppler-verschobene Linien werden vorgenommen.

## 9.3 FLUSSDIAGRAMM




Subroutine OUT :
Gewichtung mit Neutralisations- und Lichtanregungswahrscheinlichkeiten;
Ausdrucken der Enddaten des Projektils
80 , 90
Ausdrucken von Gesamtergebnissen und Verteilungen
300
Ausdrucken der Rechenzeit
Ende

## 9.4 AUFLISTUNG DES SIMULATIONS-PROGRAMMS

Das Simulations - Programm SUB wird mit folgender Kommando - Prozedur gestartet, durch die Anfangs - und Steuerdaten eingegeben werden :

```
/JOB
SUB(T4104,S10000,K0).
/USER
/CHARGE
GET,SUB.
FTN,I=SUB,L=0,OPT=1.
LGO.
REWIND,PRINT.
COPYSBF(PRINT,PRINT1).
BANNID,GRASER.
ROUTE,PRINT1.
RENAME,PR =PRINT.
REPLACE,PR .
SKIP(FEHLER)
EXIT.***FEHLER***
ENDIF(FEHLER)
SUMMARY.
DAYFILE.
REPLACE(OUTPUT=P )
/EOR
/NOSEQ
1.00  6.00 20 20 01 01 150 200. 1.250 450. 10.00 100 010 110 20
```

Das Simulations - Programm SUB lautet ( FORTRAN 4 ) :

```
C  VERSION SUB:FUER SUBMIT-JOBS
C  EINGABE DER DATEN DURCH STEUERPROGRAMM S
C   PROGRAMM-STEUERPARAMETER : NP1...NP10
C  THETA- UND PHI-SCHLEIFE : NP9
C  MIT AUSWERTUNG FUER POLARISATION
C  STUFEN AUFWAERTS, ABWAERTS ODER ALTERNIEREND, ABSTAND : NK
C  THERMISCHE SCHWINGUNGEN GAUSSVERTEILT
C  ENERGIEVERLUST NACH ROBINSON ODER STOSSPARAMETERUNABHAENGIG
C
      PROGRAM MAIN (INPUT,OUTPUT,PRINT,R,TAPE1=INPUT,TAPE2=PRINT,
     +   TAPE3=R)
      REAL LAMBDA
      DIMENSION THETAF(15),PHIF(15),NF(20,31),F(20,31),
     +   ZSI(12),ZMI(12)
      COMMON/COLL/AX,AX2,XC,YC,XSC,YSC,XTH,YTH,S,
     +  LAMBDA,AZ,AUSG(3),K
      COMMON/OUTP/IZ,JZ,XANF,PXR,PYR,E,EIN,EKEV,DE,AY2,EOUTP,EMEAN,
     +  NCOL,NO,APL(10),ANT(10),PXRRAD,PYRRAD,X,Y,MP(10),MAP(12),
     +  YMIN,RAD,NE(10),NT1(11),NT10(11),NP1,NP3,NP6,NP9,
     +  XEX,YEX,SEX,KLE,YPLG(12),YNTG(12),
     +  NDET(12),HEPLA(12),HENTA(12),SVS(12),SVM(12),PHIOUT(12),PYRDET,
     +  NGW,NP10,NACHWB,NMD,HEPLO(12),HENTO(12)
      DATA Z1,Z2,W1,W2,AL1,AL2,LAMBDA,PI
     +   /2.,28.,4.,58.6,3.542,2.504,10.,
     +      3.14159265/
      DATA YMAX/6./
      DATA UBO /0.004/
      DATA NET/15/
      DATA THETAF/.0,.25,.5,.75,1.,
     +    1.25,1.5,2.,2.5,3.,3.5,4.,4.5,5.,6./
      DATA PHIF/.25,.5,.75,1.,
     +    1.25,1.5,2.,2.5,3.,3.5,4.,4.5,5.,5.5,6./
      DATA(APL(LPL),LPL=1,10)/0.,0.,.1,.28,.47,.63,
     +    .75,.88,.97,1./
      DATA(ANT(LNT),LNT=1,10)/.3,.8,1.,1.,.89,.79,
     +    .68,.59,.53,.48/
      DATA PHIOUT/1.,1.5,2.,3.,4.,5.,10.,15.,20.,30.,45.,60./
      DATA AUSG/6H  OX  ,6H  NI  ,6H NIRE /
      TIME=SECOND(A)
C
C  EINLESEN VON DATEN AUS DEM STEUERPROGRAMM :
C
      READ(1,4)W,WEINZ,M,N,IA,JA,NK,ENKEV,H,T,PYRDET,
     +     NP1,NP2,NP3,NP4,NP5,NP6,NP7,NP8,NP9,NP10
      IF(NP10.EQ.1) WRITE(3,4)W,WEINZ,M,N,IA,JA,NK,ENKEV,H,T,PYRDET,
     +                  NP1,NP2,NP3,NP4,NP5,NP6,NP7,NP8,NP9,NP10
4     FORMAT(F4.2,F6.2,4I3,I4,F5.0,F6.3,F5.0,F6.2,
     +    3I2,2I1,I2,2I1,I2,I1)
      EIN=ENKEV*1000.
      WRITE(2,3)ENKEV,M,N
3     FORMAT(F4.0,* KEV HE GESTREUT AN EINER NI(110)-OBERFLAECHE*,
     +    /,*M =*,I3,* ;   N =*,I3)
      IF(NP9.EQ.0) WRITE(2,400)
400   FORMAT(*THETA : RANDOM*)
      IF(NP9.EQ.1) WRITE(2,401)W
401   FORMAT(*THETA =*,F6.2)
      IF(NP9.EQ.2) WRITE(2,402)W
402   FORMAT(*PHI =*,F6.2)
      UB=UBO*SQRT(T)
      U1Y=1.79*UB
      U2Y=1.21*UB
C
C  GITTERDATEN :
C
      IF(NP4.EQ.1)GOTO 5
```

```
      IF(NP4.EQ.2) GOTO 600
      PXRMAX=30.
      PYRMAX=30.
      U1X=1.15*UB
      U2X=1.02*UB
      AX=AL2
      AY=AL2
      AZ=AL1/2
      WZ=2.*AZ
      ROBNI=1.01
      WRITE(2,7)
7     FORMAT(*EINSCHUSSRICHTUNG : [001]*)
      GOTO 124
5     PXRMAX=50.
      PYRMAX=40.
      U1X=1.87*UB
      U2X=1.11*UB
      AX=AL1
      AY=AL2
      AZ=AL2/2
      WZ=2.*AZ
      ROBNI=0.94
      WRITE(2,8)
8     FORMAT(*EINSCHUSSRICHTUNG : [1-10]*)
      GOTO 124
600   PXRMAX=20.
      PYRMAX=25.
      U1X=1.3*UB
      U2X=UB
      AX=AL1/SQRT(3.)
      AY=AL2/2
      AZ=AL1*SQRT(1.5)
      WZ=AZ
      ROBNI=1.49
      WRITE(2,601)
601   FORMAT(*EINSCHUSSRICHTUNG : [1-12]*)
124   IF(NP6.EQ.0) WRITE(2,127)
127   FORMAT(*OHNE STUFEN*)
      IF(NP6.EQ.1) WRITE(2,125) NK
125   FORMAT(*STUFEN AUFWAERTS, STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
      IF(NP6.EQ.2) WRITE(2,128)NK
128   FORMAT(*STUFEN ABWAERTS, STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
      IF(NP6.EQ.3) WRITE (2,131) NK
131   FORMAT(*STUFEN ALTERNIEREND, STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
      IF(T.EQ.0.)GOTO 9
      WRITE(2,1)T
1     FORMAT(*ANISOTROPE GITTERSCHWINGUNGEN, T=*,F5.0,*K*)
      GOTO 10
9     WRITE(2,2)
2     FORMAT(*STARRES GITTER*)
10    IF(NP1.EQ.1) GOTO 11
      WRITE(2,12)
12    FORMAT(*ENERGIEVERLUST STOSSPARAMETER-UNABHAENGIG*)
      GOTO 17
11    WRITE(2,13)
13    FORMAT(*ENERGIEVERLUST NACH ROBINSON*)
17    IF(NP2.NE.0)GOTO 14
      WRITE(2,15)
15    FORMAT(*OHNE SAUERSTOFF*)
      GOTO 23
14    WRITE(2,16)NP2,H
16    FORMAT(*MIT 1/*,I2,* ML SAUERSTOFF,HOEHE =*,F6.3,* ANGSTROM*)
      IF(NP5.EQ.2) GOTO 31
      IF(NP5.EQ.0)GOTO 21
      IF(NP4.EQ.2) GOTO 23
```

```
      WRITE(2,22)
22    FORMAT(*BRUECKENPOSITION UEBER DER KETTE*)
      GOTO 23
21    WRITE(2,24)
24    FORMAT(*BRUECKENPOSITION ZWISCHEN ZWEI KETTEN*)
      GOTO 23
28    WRITE(2,29)
29    FORMAT(*TOP-POSITION*)
      GOTO 23
31    WRITE(2,32)
32    FORMAT(*REKONSTRUKTION NACH VAN DEN BERG*)
23    WRITE(2,65) PYRDET
65    FORMAT(*AUSTRITTSWINKEL BIS : *,F5.2,* GRAD (PYRDET)*)
C
C   BERECHNUNG VON KONSTANTEN:
C
      RAD=PI/180
      AX2=AX/2
      AY2=AY/2
      AYH=H/2-AY2/2
C  THOMAS-FERMI-RADIEN NACH LINDHARD :
      ATFNI=0.14245
      ATFOX=0.19813
      FENI=14.3888*Z1*Z2/ATFNI
      FEOX=14.3888*Z1*8./ATFOX
      ROBOX=0.30
      DE=EIN/10000.
C
C  GRENZEN DES FLUSSDICHTE-RASTERFELDES IN Y-RICHTUNG :
C
      OGY=AL2*(1.+1./(20.*2.))
      UGY=-AL2*(.5+1./(20.*2.))
C
C   START DER EINSCHUSSWINKEL-SCHLEIFE
C  ODER SPUR EINES EINZELNEN TEILCHENS:
C
      NAT=1
      IF(NP3.EQ.2.OR.NP7.EQ.0) NET=1
      DO 300 NT=NAT,NET
      NTS=NT
      IF(NP7.EQ.2)NTS=NET+1-NT
      IF(NP9.EQ.2) GOTO 60
      PHI=PHIF(NTS)
      IF(NET.EQ.1) PHI=WEINZ
      THETA=W
      GOTO 61
60    THETA=THETAF(NTS)
      IF(NET.EQ.1) THETA=WEINZ
      PHI=W
61    PHIRAD=PHI*RAD
      THERAD=THETA*RAD
      IF(NP9.EQ.2) GOTO 410
      WRITE(2,50) PHI
50    FORMAT(/,/,/,*  PHI =*,F5.2,* :*,/,*--------------------*,/)
      GOTO 412
410   WRITE(2,411) THETA
411   FORMAT(/,/,/,* THETA =*,F5.2,* :*,/,*--------------------*,/)
C
C  ANFANGSWERTE GLEICH NULL SETZEN :
C
412   DO 52 L=1,10
52    NE(L)=0
      DO 53 LT=1,11
      NT1(LT)=0
53    NT10(LT)=0
```

```
      DO 54 J=1,31
      DO 55 I=1,20
55    NF(I,J)=0
      DO 56 MPYRN=1,10
56    MP(MPYRN)=0
      DO 57 MAPYRN=1,12
57    MAP(MAPYRN)=0
54    CONTINUE
      DO 58 NPHI=1,12
      NDET(NPHI)=0
      YPLG(NPHI)=0.
      YNTG(NPHI)=0.
      HEPLO(NPHI)=0.
      HENTO(NPHI)=0.
      HEPLA(NPHI)=0.
      HENTA(NPHI)=0.
      SVS(NPHI)=0.
      SVM(NPHI)=0.
58    CONTINUE
      NACHWB=0
      NPXR=0
      NPYR=0
      NGW=0
      NEX=0
      NYMAX=0
      NMD=0
      TARG=0
      EMEAN=0
C
C  EINGANGSRASTER,ABHAENGIG VON GITTERDIMENSION WZ ODER
C  SAUERSTOFFBEDECKUNG NP2 ; BEI STUFEN WIRD DIE LAGE
C  DER STUFEN VERAENDERT
C
      NWZ=NP2
      IF(NP2.EQ.0) NWZ=1
      DELTAX=AX/M
      DELY=TAN(PHIRAD)*WZ*NWZ/COS(THERAD)
      DELTAY=DELY/N
C
C  UEBERSCHRIFTEN FUER EINZELERGEBNISSE BEZW. SPUR :
C
      IF(NP3.EQ.1)WRITE(2,35)
      IF(NP3.EQ.2)WRITE(2,36)
35    FORMAT(/,/,3H  I,3H  J,7H  XANF ,8H     XEND,8H     YEND,
     +   8H     YMIN,7H    PXR ,7H    PYR ,7H     PR ,
     +   7H    E    ,7H  EOUTP,7H   NCOL,
     +   7H   END ,5H ANR ,/)
36    FORMAT(/,/,5H NCOL,6H STOSS,3H NO,4H  K ,
     +   8H     X    ,8H     Y    ,
     +    8H     XC  ,8H     YC  ,8H     XTH ,8H     YTH ,
     +    8H     XEX ,8H     YEX ,8H     SEX ,
     +    8H     PXR ,8H     PYR ,8H    E     ,/)
      IF(NP3.EQ.2) GOTO 129
      NAS=1
      NES=N
      MAS=1
      MES=M
      GOTO 132
129   NAS=JA
      NES=JA
      MAS=IA
      MES=IA
C
C  START DER I- UND J-SCHLEIFE :
C
```

```
132   DO 90 J=NAS,NES
      DO 80 I=NAS,NES
C
C  START-BEDINGUNGEN DES PROJEKTILS:
C
      IZ=I
      JZ=J
      XANF=-AX2+(I-1)*DELTAX
      IF(NP6.NE.0) K=J*NK/N
      IF(NP6.EQ.3) K=-NK+J*2*NK/N
      Y=YMAX-(J-1)*DELTAY
      IF(NP6.NE.0) Y=YMAX
      YMIN=Y
      X=XANF
      NCOL=0
      NO=0
      MK=1
      EOUTP=0
      XEX=10.
      YEX=10.
      SEX=10.
      PXR=-THETA
      PYR=-PHI
      PXRRAD=PXR*RAD
      PYRRAD=PYR*RAD
      XC=X
      YC=Y
      AK=-AY2
      E=EIN
      XTH=0
      YTH=0
C
C  BEGINN DER STOSS-SCHLEIFE :
C
100   CONTINUE
C
C  FLUSSDICHTEVERTEILUNG :
C
      IF(NP8.EQ.0) GOTO 59
      IF(NP4.EQ.2) GOTO 98
      IF(AK.GT.0.) GOTO 59
98    IF(Y.GE.OGY.OR.Y.LT.UGY) GOTO 59
      RX=10.*(XC/AX2+1.0)+0.5
      IFL=INT(RX)+1
      IF(IFL.EQ.21) IFL=1
      RY=20.*(1.-Y/AL2)+0.5
      JFL=INT(RY)+1
      NF(IFL,JFL)=NF(IFL,JFL)+1
59    CONTINUE
C
C  ABFRAGE,OB IN DIESER QUEREBENE EIN SAUERSTOFFATOM SEIN KANN:
C
      IF(AK.LT.0..AND.NO.EQ.NP2) NO=0
      IF(AK.LT.0.) NO=NO+1
C
C  BERECHNUNG GAUSSVERTEILTER ZUFALLSZAHLEN NACH DER POLARMETHODE :
C  HALBWERTSBREITE = 1 ; MITTELWERT = 0
C  FUER THERMISCHE GITTERSCHWINGUNGEN
C
190   XRAN=2.*RANF(0)-1.
      YRAN=2.*RANF(0)-1.
      SQARSUM=XRAN*XRAN+YRAN*YRAN
      IF(SQARSUM.GE.1.) GOTO 190
      SQARSUM=SQRT(-2.*ALOG(SQARSUM)/SQARSUM)
      XRAN=XRAN*SQARSUM
```

```
      YRAN=YRAN*SQARSUM
C
C  ENTSCHEIDUNG : STREUUNG AN NICKEL- ODER SAUERSTOFF-ATOM :
C
      IF(NP2.EQ.0)GOTO 107
      IF(NP4.EQ.2) GOTO 115
      IF(NP5.EQ.2.AND.NP4.EQ.0) GOTO 106
      IF(NP5.EQ.2.AND.NP4.EQ.1) GOTO 146
      IF(NP5.EQ.0)GOTO 106
146   IF(AK.GT.0)GOTO 102
      GOTO 107
106   IF(AK.LT.0)GOTO 102
      IF(NP5.EQ.2.AND.NO.EQ.0) GOTO 145
      GOTO 107
102   IF(NO.EQ.NP2) GOTO 108
      GOTO 107
108   IF(Y.GT.AYH.AND.ABS(XC).GT.(AX2/2))GOTO 103
      IF(NP5.NE.2.OR.NP4.NE.1) GOTO 107
145   IF(Y.GT.0.AND.ABS(XC).LE.(AX2/2)) GOTO 140
C
C  STREUUNG AN NICKEL :
C
107   IF(T.EQ.0)GOTO 101
      IF(Y.GE.-AY2.AND.AK.LT.0.) GOTO 110
      IF(Y.GE.-AY.AND.AK.GT.0.) GOTO 120
      XTHM=UB
      YTHM=UB
      GOTO150
110   XTHM=U1X
      YTHM=U1Y
      GOTO 150
120   XTHM=U2X
      YTHM=U2Y
150   XTH=XTHM*XRAN
      YTH=YTHM*YRAN
101   IF(NP3.NE.2) GOTO 113
      EKEV=E/1000.
113   CALL COLLIS(ATENI,FENI,ROBNI,2)
      GOTO 104
C
C  STREUUNG AN REKONSTRUIERENDEM NI-ATOM:
C
140   YC=Y-1.252
      IF(T.EQ.0) GOTO 141
      XTHM=U1X
      YTHM=U1Y
      XTH=XTHM*XRAN
      YTH=YTHM*YRAN
141   IF(NP3.NE.2) GOTO 142
      EKEV=E/1000.
142   CALL COLLIS(ATENI,FENI,ROBNI,3)
      YC=Y+AY2
      GOTO 104
C
C  STREUUNG AN SAUERSTOFF BEI [1-10]- UND [001]-RICHTUNG :
C
103   XC=XC-SIGN(AX2,XC)
      YC=Y-H
      IF(T.EQ.0.)GOTO 105
      XTHM=U1X
      YTHM=U1Y
      XTH=XTHM*XRAN
      YTH=YTHM*YRAN
105   IF(NP3.NE.2) GOTO 122
      EKEV=E/1000.
```

```
122   CALL COLLIS (ATFOX,FEOX,ROBOX,1)
      IF(PYR.GT.0) GOTO 136
      XEX=10.
      YEX=10.
      SEX=10.
      GOTO 135
136   IF(S.GT..529) GOTO 135
      XEX=XSC
      YEX=YSC
      SEX=S
135   XC=XC-SIGN(AX2,XC)
      IF(AK.GT.0)GOTO 111
      YC=Y
      GOTO 112
111   YC=Y+AY2
112   GOTO 104
C
C  STREUUNG AN SAUERSTOFF BEI [1-12]-RICHTUNG :
C
115   IF(NO.EQ.NP2) GOTO 116
      GOTO 107
116   IF(NP5.EQ.1) GOTO 117
      IF(Y.GT.AYH.AND.ABS(XC).GT.(AX2/2)) GOTO 118
      IF(NP5.NE.2) GOTO 107
      IF(Y.GE.AY2.AND.ABS(XC).LE.(AX2/2)) GOTO 140
      GOTO 107
117   IF(Y.GT.H/2.AND.ABS(XC).LT.(AX2/2)) GOTO 119
      GOTO 107
118   XC=XC-SIGN(AX2,XC)
119   YC=Y-H
      IF(T.EQ.0.) GOTO 121
      XTHM=U1X
      YTHM=U1Y
      XTH=XTHM*XRAN
      YTH=YTHM*YRAN
121   IF(NP3.NE.2) GOTO 134
      EKEV=E/1000.
134   CALL COLLIS (ATFOX,FEOX,ROBOX,1)
      IF(PYR.GT.0) GOTO 137
      XEX=10.
      YEX=10.
      SEX=10.
      GOTO 138
137   IF(S.GT..529) GOTO 138
      XEX=XSC
      YEX=YSC
      SEX=S
138   IF(NP5.EQ.0.OR.NP5.EQ.2) XC=XC-SIGN(AX2,XC)
      YC=Y
104   IF(Y.GE.YMIN) GOTO 27
      YMIN=Y
C
C  ABBRUCHBEDINGUNGEN :
C
C  27    IF(NCOL.EQ.300) GOTO 37
27    IF(ABS(PXR).GE.PXRMAX) GOTO 26
      IF(ABS(PYR).GE.PYRMAX) GOTO 19
      IF(Y.GT.(YMAX+1.5)) GOTO 20
      GOTO 41
26    IF(ABS(PXR).GT.45..OR.PYR.LE.0..OR.PYR.GE.60.) GOTO 37
      GOTO 33
37    NPXR=NPXR+1
      NEND=1
      GOTO 30
19    IF(PYR.LT.60.AND.PYR.GT.0.) GOTO 33
```

```
34    NPYR=NPYR+1
      NEND=2
      GOTO 30
C
C  EXTRAPOLATION DER BAHN :
C
33    DL=-Y/(SIN(PYRRAD)*COS(PXRRAD))
      WE=-(0.107/2.)*DL+SQRT(E)
      IF(WE.LE.0.) GOTO 34
      E=WE*WE
      IF(Y.LE.(-50.)) GOTO 38
      IF(Y.GE.0.) GOTO 40
      FT=1.-EXP(Y/LAMBDA)
      GOTO 39
38    FT=1.
39    EOUTP=EOUTP+0.107*FT*SQRT(E)/(LAMBDA*TAN(PYRRAD))
40    NEX=NEX+1
      NEND=3
      GOTO 30
20    NYMAX=NYMAX+1
      NEND=4
      GOTO 30
C
C  ABSPEICHERN DER ENDDATEN UND
C  AUFRUF DES UNTERPROGRAMMS OUT(NEND) :
C
30    TARG=TARG+EOUTP
      IF(NP3.EQ.2) WRITE(2,35)
C     IF(NP10.EQ.1) WRITE(3,70)IZ,JZ,XANF,X,Y,YMIN,PXR,PYR,
C    +  E,EOUTP,NCOL,XEX,YEX,SEX,NEND
C 70    FORMAT(2I3,F7.3,3F8.2,2F7.2,F8.0,F7.2,I7,3F7.3,I3)
      IF(NP10.EQ.1) WRITE(3,70)PXR,PYR,E,NEND
70    FORMAT(2F7.2,F8.0,I2)
      CALL OUT(NEND)
      GOTO 80
C
C  TRANSFORMATIONEN ZUR SIMULATION EINES FCC-KRISTALLS:
C
41    IF(NP4.EQ.2) GOTO 44
      XC=XC-SIGN(AX2,XC)
      AK=-AK
      IF(Y.GE.0.) GOTO 45
      YC=YC-SIGN(AY2,YC)
      GOTO 42
45    YC=YC+AK
      GOTO 42
44    IF(ABS(XC).GE.AX2) XC=XC-SIGN(AX,XC)
      IF(ABS(YC).GE.AY2.AND.Y.LT.AY2) YC=YC-SIGN(AY,YC)
      IF(ABS(YC).GE.AY2.AND.Y.LT.AY2) YC=YC-SIGN(AY,YC)
C
C  ENTSCHEIDUNGEN, OB AUFWAERTS- ODER ABWAERTS-STUFE :
C
42    IF(NP6.EQ.0) GOTO 46
      IF(NP4.EQ.2.AND.K.EQ.NK) GOTO 43
      IF(K.GE.NK.AND.AK.GT.0) GOTO 43
      K=K+1
      GOTO 46
43    IF(NP6.EQ.1) GOTO 431
      IF(NP6.EQ.2) GOTO 432
      IF(NP6.EQ.3.AND.MK.EQ.1) GOTO 431
      IF(NP6.EQ.3.AND.MK.EQ.(-1)) GOTO 432
C
C  TRANSFORMATION FUER AUFWAERTS-STUFEN:
C
431   IF(NP4.EQ.2) GOTO 435
```

```
      IF(Y.GE.0.) YC=YC-AY
      Y=Y-AY2
      AK=-AK
      K=1
      MK=-MK
      GOTO 46
435   IF(Y.GE.AY2) YC=YC-AY
      Y=Y-AY
      K=1
      MK=-MK
      GOTO 46
C
C  TRANSFORMATION FUER ABWAERTS-STUFEN :
C
432   IF(NP4.EQ.2) GOTO 436
      Y=Y+AY2
      AK=-AK
      K=1
      MK=-MK
      GOTO 46
436   IF(Y.GE.AY2) YC=YC+AY
      Y=Y+AY
      K=1
      MK=-MK
      GOTO 46
C
C  ENDE DER STOSSSCHLEIFE :
C
46    GOTO 100
C
C  ENDE DER J-SCHLEIFE :
C
80    CONTINUE
C
C  ENDE DER I-SCHLEIFE :
C
90    CONTINUE
C
C  BERECHNUNG VON GESAMTERGEBNISSEN :
C
      EMEAN=EMEAN/NACHWB
      NMD=NMD/NACHWB
      DO 82 NPHI=1,12
      YPLG(NPHI)=YPLG(NPHI)/(M*N)
      YNTG(NPHI)=YNTG(NPHI)/(M*N)
      ZSI(NPHI)=SVS(NPHI)/HEPLA(NPHI)
      ZMI(NPHI)=SVM(NPHI)/HEPLA(NPHI)
      HEPLO(NPHI)=HEPLO(NPHI)/(2.*SQRT(2.)*M*N)
      HENTO(NPHI)=HENTO(NPHI)/(M*N)
      HEPLA(NPHI)=HEPLA(NPHI)*10./(M*N)
      HENTA(NPHI)=HENTA(NPHI)*10./(M*N)
C     ZSI(NPHI)=SVS(NPHI)/NDET(NPHI)
C     ZMI(NPHI)=SVM(NPHI)/NDET(NPHI)
82    CONTINUE
      WRITE(2,85)NACHWB,NPXR,NPYR,NGW,NEX,NYMAX,NMD,TARG,EMEAN
85    FORMAT(/,*NACHWB =*,I4,   * ;  NPXR =*,I4,* ;  NPYR =*,I4,
     +       * ;  NGW =*,I4,
     +       * ;  NEX =*,I4,* ;  NYMAX =*,I4,* ;  NMD =*,I5,
     +       * ;  TARG =*,F9.2,* ;  EMEAN=*,F7.2,/,/)
      WRITE(2,91) PHIOUT,NDET,YPLG,YNTG,HEPLO,HENTO,HEPLA,HENTA,ZSI,ZMI
91    FORMAT(*VERTEILUNGEN ALS FUNKTION DES AUSTRITTSWINKELS :*,/,/,
     +  *PHI=0 BIS :*,12F7.2,/,
     +  *      NDET :*,12I7  ,/,/,
     +  *      YPLG :*,12F7.4,/,
     +  *      YNTG :*,12F7.4,/,/,
```

```
     +  *     HEPLO :*,12F7.4,/,
     +  *     HENTO :*,12F7.4,/,/,
     +  *     HEPLA :*,12F7.4,/,
     +  *     HENTA :*,12F7.4,/,
     +  *       S/I :*,12F7.3,/,
     +  *       M/I :*,12F7.3,/,/)
      WRITE(2,89) MP
89    FORMAT(*VERTEILUNG DER AUSTRITTSWINKEL PHI :*,/,
     +*PHI    :   0-1   1-2   2-3   3-4   4-5   5-6*,
     +        *   6-7   7-8   8-9  9-10*,/,
     +  *ANZAHL:*,10I6,/,/)
      WRITE(2,81)MAP
81    FORMAT(*PHI    :    0-5  5-10 10-15 15-20 20-25 25-30 30-35*,
     +              * 35-40 40-45 45-50 50-55 55-60*,/,
     +  *ANZAHL:*,12I6,/,/)
      WRITE(2,86) NE
86    FORMAT(*ENERGIEVERTEILUNG DER NACHWEISBAREN TEILCHEN:*,/,
     +*KANAL-NR:     1     2     3     4     5     6     7     8     9    10*,/,
     +*ANZAHL   :*, 10I5,/,/)
C
C  FALTUNG MIT LICHTANREGUNGSWERTEN VON TRUCKENBRODT
C  UEBER ENERGIEVERTEILUNG :
C
      HEPL=0
      HENT=0
      DO 200 LEPL=1,10
200   HEPL=HEPL+NE(LEPL)*APL(LEPL)
      HEPL=HEPL/(M*N)
      DO 210 LENT=1,10
210   HENT=HENT+NE(LENT)*ANT(LENT)
      HENT=HENT/(M*N)
      WRITE(2,220) HEPL,HENT
220   FORMAT(*LICHTINTENSITAETEN : 468.6 NM ( HE + ) : *,F5.3,
     +       * ;   587.6 NM ( HE-D ) : *,F5.3,/,/)
      WRITE(2,87) NT1
87    FORMAT(*VERTEILUNG DER EINDRINGTIEFEN*,
     +       * DER NACHWEISBAREN TEILCHEN :*,/,
     +*REFL.EBENE    :*,
     +*      1     2     3     4     5*,
     +*      6     7     8     9    10  TIEFER*,/,
     +*ANZAHL        :*,10I6,I8,/,/)
      WRITE(2,88) NT10
88    FORMAT(*REFL.EBENE    :*,
     +*     10    20    30    40    50*,
     +*     60    70    80    90   100  TIEFER*,/,
     +*ANZAHL        :*,10I6,I8,/,/)
      IF(NP8.EQ.0) GOTO 300
      WRITE(2,240)
240   FORMAT(/,*FLUSSVERTEILUNG :*,/)
      FNORM=400.*DELY/(M*N*AL2*NWZ)
      DO 231 JFL=1,31
      DO 230 IFL=1,20
230   F(IFL,JFL)=NF(IFL,JFL)*FNORM
231   CONTINUE
      WRITE(2,250)F
250   FORMAT(/,20F5.2)
300   CONTINUE
      TIME=SECOND(A)-TIME
      WRITE(2,95)TIME
95    FORMAT(/,/,*RECHENZEIT :*,F10.3,* SEC*,/)
      END
      SUBROUTINE OUT(NEND)
      DIMENSION TEND(6),TANF(3)
      COMMON/OUTP/IZ,JZ,YANF,PXR,PYR,E,EIN,EKEV,DE,AY2,EOUT2,EMEAN,
     +  NCOL,NP,APL(10),ANT(10),PXRRAD,PYRRAD,X,Y,MP(10),MAP(12),
```

```
     +   YMIN,RAD,NE(10),NT1(11),NT10(11),NP1,NP3,NP6,NP9,
     +   XEX,YEX,SEX,KLE,YPLG(12),YNTG(12),
     +   NDET(12),NEPLA(12),NENTA(12),SVS(12),SVM(12),PHIOUT(12),PYRDET,
     +   NGW,NP10,NACHWB,NMD,NEPLO(12),NENTO(12)
      DATA TEND/7H  PXR  ,7H    PYR,7H EX *  ,7H    *  ,
     +          7H EX GW ,7H    GW /
      DATA TANR/5H     ,5H OBER,5HSAUER/
      PR=SQRT(PXR*PXR+PYR*PYR)
      E=E/1000.
      EN=EIN/1000
      VIPLA=0.
      VINTA=0.
      VIPLO=0.
      VINTO=0.
      VS=0.
      VM=0.
C
C  BESTIMMUNG DER NACHWEISVARIABLEN NEND=5;6 :
C
      IF(NEND.EQ.3.AND.PYR.GT.PYRDET) NEND=5
      IF(NEND.EQ.4.AND.PYR.GT.PYRDET) NEND=6
      IF(NEND.EQ.5.OR.NEND.EQ.6) NGW=NGW+1
C
C  BESTIMMUNG DER ANREGUNGSVARIABLEN NANR :
C
      IF(NEND.LE.2) GOTO 11
      IF(NEND.EQ.3.OR.NEND.EQ.5) GOTO 12
      IF(XEX.EQ.10.) GOTO 12
      NANR=3
      GOTO 20
11    NANR=1
      GOTO 20
12    NANR=2
      GOTO 20
C
C  AUSDRUCKEN DES ENDERGEBNISSES EINES TEILCHENS :
C
20    IF(NP3.NE.0) WRITE(2,10)IZ,JZ,XANF,X,Y,YMIN,PXR,PYR,PR,
     +   E,EOUTP,NCOL,TEND(NEND),TANR(NANR)
10    FORMAT(2I3,F7.3,3F8.2,3F7.2,F7.1,F7.2,I7,A7,A5)
C
C  WINKELVERTEILUNG ALLER AUSTRETENDEN TEILCHEN :
C
      IF(NEND.LE.2) GOTO 50
      MPYR=INT(PYR)+1
      IF(MPYR.GT.10.) GOTO 34
      MP(MPYR)=MP(MPYR)+1
34    MAPYR=INT(PYR/5.)+1
      MAP(MAPYR)=MAP(MAPYR)+1
C
C  ENERGIEVERTEILUNG DER NACHWEISBAREN TEILCHEN :
C
      IF(NEND.GE.5) GOTO 30
      NACHWB=NACHWB+1
      NMD=NMD+NCOL
      EMEAN=EMEAN+E
      DO 60 LE=1,10
      IF(E.GT.(EN-(11-LE)*DE).AND.E.LE.(EN-(10-LE)*DE)) GOTO 70
60    CONTINUE
70    NE(LE)=NE(LE)+1
      KLE=LE
C
C  BERECHNUNG VON KONSTANTEN :
C
C
```

```
30    VB=2.2
      VO=SQRT(E/100.)
      V=VB*VO
C
C  NEUTRALISATION :
C
      YKR=0.6*VO*VO*VO
      YPL=1./(1.+1./YKR)
      YNT=1./(1.+YKR)
C
C  LICHT-ANREGUNG :
C
      VIPL=YKR/0.6
      VINT=YNT
      VIPLO=VIPL
      IF(V.LE.0.05) GOTO 41
      VINTO=VINT*EXP(-1.2/V)
      GOTO 40
41    VINTO=0.
C
C  LICHT-ABREGUNG ; OHNE ABREGUNG : GOTO 18
C
40    IF(NANR.EQ.3) GOTO 45
      VSENK=V*SIN(PYRRAD)
      IF(VSENK.LE.0.05) GOTO 42
      VIPLA=VIPL*EXP(-.25/VSENK)
      VINTA=VINT*EXP(-1.2/VSENK)
      GOTO 18
42    VIPLA=0.
      VINTA=0.
      GOTO 18
45    VIPLA=VIPLO
      VINTA=VINTO
C
C  BERECHNUNG DER POLARISATION :
C
18    IF(NANR.EQ.2) GOTO 25
      COS1=YEX/SEX
      COS2=COS1*COS1
      IF(YEX.LT.0.) GOTO 21
      VS=2*COS2/(1+COS2)
      GOTO 22
21    VS=-2.*COS2/(1+COS2)
22    VM=(COS2-1)/(COS2+1)
      GOTO 26
25    VS=1.
      VM=0.
C
C  VERTEILUNGEN ALS FUNKTION DES AUSTRITTSWINKELS :
C
26    DO 28 NPHI=1,12
      IF(PYR.GT.PHIOUT(NPHI)) GOTO 28
      NDET(NPHI)=NDET(NPHI)+1
      YPLG(NPHI)=YPLG(NPHI)+YPL
      YNTG(NPHI)=YNTG(NPHI)+YNT
      HEPLO(NPHI)=HEPLO(NPHI)+VIPLO
      HENTO(NPHI)=HENTO(NPHI)+VINTO
      HEPLA(NPHI)=HEPLA(NPHI)+VIPLA
      HENTA(NPHI)=HENTA(NPHI)+VINTA
      SVS(NPHI)=SVS(NPHI)+VS*VIPLA
      SVM(NPHI)=SVM(NPHI)+VM*VIPLA
28    CONTINUE
C
C  VERTEILUNG DER EINDRINGTIEFEN DER NACHWEISBAREN TEILCHEN:
C
```

```
      IF(NEND.GE.5) GOTO 50
      TIEF1=-9.*AY2
      IF(YMIN.GE.0)NT1(1)=NT1(1)+1
      IF(YMIN.LT.TIEF1)NT1(11)=NT1(11)+1
      TL=0
      DO 62 LT1=2,10
      IF(YMIN.LT.TL.AND.YMIN.GE.(TL-AY2)) GOTO 72
      TL=TL-AY2
62    CONTINUE
      GOTO 73
72    NT1(LT1)=NT1(LT1)+1
73    TIEF10=-99.*AY2
      IF(YMIN.GE.(-9.*AY2))NT10(1)=NT10(1)+1
      IF(YMIN.LT.TIEF10)NT10(11)=NT10(11)+1
      TL=-9.*AY2
      DO 64 LT10=2,10
      IF(YMIN.LT.TL.AND.YMIN.GE.(TL-10.*AY2)) GOTO 74
      TL=TL-10.*AY2
64    CONTINUE
      GOTO 50
74    NT10(LT10)=NT10(LT10)+1
50    RETURN
      END
      SUBROUTINE COLLIS(ATF,FE,ROB,MOD)
      REAL LAMBDA
      COMMON/COLL/AX,AX2,XC,YC,XSC,YSC,XTH,YTH,S,
     +  LAMBDA,AZ,AUSG(3),K
      COMMON/OUTP/IZ,JZ,XANF,PXR,PYR,E,EIN,EKEV,DE,AY2,EOUTP,EMEAN,
     +  NCOL,ND,APL(10),ANT(10),PXRRAD,PYRRAD,X,Y,MP(10),MAP(12),
     +  YMIN,RAD,NE(10),NT1(11),NT10(11),NP1,NP3,NP6,NP9,
     +  XEX,YEX,SEX,KLE,YPLG(12),YNTG(12),
     +  NDET(12),HEPLA(12),HENTA(12),SVS(12),SVM(12),PHIOUT(12),PYRDET
     +  NGW,NP10,NACHWB,NMD,HEPLO(12),HENTO(12)
      XSC=XC-XTH
      YSC=YC-YTH
      S=SQRT(XSC*XSC+YSC*YSC)
C  BERECHNUNG DES STREUWINKELS DELTA :
C
8     RHO=S/ATF
      IF(RHO.GE.1.5) GOTO 10
      DELTA=1.01*FE/E*EXP(-0.5*RHO)/RHO
      GOTO 20
10    DELTA=FE*(0.03*ABS(RHO-3.8)+0.64)*
     +      EXP(-0.3*RHO)/(RHO*E)
      GOTO 20
20    DS=DELTA/S
      PXRRAD=PXRRAD+DS*XSC
      PYRRAD=PYRRAD+DS*YSC
      DX=AZ*PXRRAD
      DY=AZ*PYRRAD
      PXR=PXRRAD/RAD
      PYR=PYRRAD/RAD
      XC=XC+DX
      YC=YC+DY
      X=X+DX
      Y=Y+DY
      IF(NP9.EQ.0) XC=(RANF(0)-0.5)*AX
      IF(NP1.EQ.0)GOTO 25
      ELIN=ROB*SQRT(E)*EXP(-0.3*RHO)
      GOTO 26
25    IF(Y.GE.0.) GOTO 30
      ELIN=0.107*SQRT(E)*AZ
26    E=E-ELIN
      IF(Y.LE.(-20.)) GOTO 30
      EOUTC=ELIN*EXP(Y/LAMBDA)/1000.
```

```
      EOUTP=EOUTP+EOUTC
30    NCOL=NCOL+1
C
C   AUSDRUCK DES ERGEBNISSES DES STOSSES BEI SPUR :
C
      IF(NP3.EQ.2) WRITE(2,15) NCOL,AUSG(MOD),NO,K,X,Y,XC,YC,
     +     XTH,YTH,XEX,YEX,SEX,PXR,PYR,EKEV
15    FORMAT(I5,A6,I3,I4,12F8.2)
      RETURN
      END
```

## 9.5 AUFLISTUNG DES GETRENNTEN AUSWERTPROGRAMMS

Das Auswertprogramm AUSW wird mit folgender Kommando - Prozedur gestartet, durch die Steuerdaten eingegeben werden :

```
/JOB
AUSW.
/USER
/CHARGE
GET,AUSW.
GET,R.
FTN,I=AUSW,L=0,OPT=1.
LGO.
REWIND,PRINT.
COPYSBF(PRINT,PRINT1).
BANNID,GRASER.
ROUTE,PRINT1.
RENAME,PAR =PRINT.
REPLACE,PAR .
SKIP(FEHLER)
EXIT.***FEHLER***
ENDIF(FEHLER)
SUMMARY.
DAYFILE.
REPLACE(OUTPUT=PA)
/EOR
/NOSEQ
10.00 1.20 1.00 1.45 1 1
```

Das Auswert - Programm AUSW lautet :

```
C  AUSWERTPROGRAMM AUSW
C  FUER ABGESPEICHERTE DATEN IN DATEI R=TAPE3
C  EINGABE VON STEUERDATEN : IM STEUERPROGRAMM A
C
      PROGRAM MAIN (INPUT,OUTPUT,PRINT,R,TAPE1=INPUT,TAPE2=PRINT,
     +    TAPE3=R)
      REAL LAMBDA
      DIMENSION THETAF(15),PHIF(15),NF(20,31),F(20,31),
     +  ZSI(12),ZMI(12)
      COMMON/COLL/AX,AX2,XC,YC,XSC,YSC,XTH,YTH,S,
     +  LAMBDA,AZ,AUSG(3)
      COMMON/OUTP/IZ,JZ,XANF,PXR,PYR,E,EIN,EKEV,DE,AY2,EOUTP,EMEAN,
     +  NCOL,NO,APL(10),ANT(10),PXRRAD,PYRRAD,X,Y,MP(10),MAP(12),
     +  YMIN,RAD,NE(10),NT1(11),NT10(11),NP1,NP3,NP9,XEX,YEX,SEX,KLE,
     +  NDET(12),HEG(12),SVS(12),SVM(12),PHIOUT(12),PYRDET,
     +  NACHWB,NMD,NGW,NP10,VC,B1,B2,EWB,DEB,NPN
      DATA Z1,Z2,W1,W2,AL1,AL2,LAMBDA,PI
     +   /2.,28.,4.,58.6,3.542,2.504,10.,
     +      3.14159265/
      DATA YMAX/6./
      DATA UBO /0.004/
      DATA NET/15/
      DATA THETAF/.0,.25,.5,.75,1.,
     +    1.25,1.5,2.,2.5,3.,3.5,4.,4.5,5.,6./
      DATA PHIF/.25,.5,.75,1.,
     +    1.25,1.5,2.,2.5,3.,3.5,4.,4.5,5.,5.5,6./
      DATA(APL(LPL),LPL=1,10)/0.,0.,.1,.28,.47,.63,
     +    .75,.88,.97,1./
      DATA(ANT(LNT),LNT=1,10)/.3,.8,1.,1.,.89,.79,
     +    .68,.59,.53,.48/
      DATA PHIOUT/.8,.9,1.,1.5,2.,5.,10.,15.,20.,30.,45.,60./
      DATA AUSG/6H  OX  ,6H  NI  ,6H NIRE /
      TIME=SECOND(A)
C
C  EINLESEN VON ABGESPEICHERTEN STEUERDATEN :
C
      READ(3,4)W,WEINZ,M,N,IA,JA,NK,ENKEV,H,T,PYRDET,
     +     NP1,NP2,NP3,NP4,NP5,NP6,NP7,NP8,NP9,NP10
4     FORMAT(F4.2,F6.2,4I3,I4,F5.0,F6.3,F5.0,F6.2,
     +    3I2,2I1,I2,2I1,I2,I1)
C
C  EINLESEN VON DATEN AUS DEM AUSWERTUNGS-STEUERPROGRAMM :
C
      READ(1,40) PYRDET,VC,B1,B2,NP3,NPN
40    FORMAT(4F5.2,2I2)
      EIN=ENKEV*1000
      IF(NPN.EQ.0) GOTO 36
      WRITE(2,18)
18    FORMAT(*AUSWERTUNG FUER HE+(468.6 NM) :*,/,
     +       *--------------------------------*,/,/)
      GOTO 38
36    WRITE(2,37)
37    FORMAT(*AUSWERTUNG FUER HE0(587.6 NM) :*,/,
     +       *--------------------------------*,/,/)
38    WRITE(2,3)ENKEV,M,N
3     FORMAT(F4.0,* KEV HE GESTREUT AN EINER NI(110)-OBERFLAECHE*,
     +    /,*M =*,I3,* ;   N =*,I3)
      IF(NP9.EQ.0) WRITE(2,400)
400   FORMAT(*THETA : RANDOM*)
      IF(NP9.EQ.1) WRITE(2,401)W
401   FORMAT(*THETA =*,F6.2)
      IF(NP9.EQ.2) WRITE(2,402)W
402   FORMAT(*PHI =*,F6.2)
C
C  GITTERDATEN :
```

```
C
      DEB=AL2/2.
      IF(NP4.EQ.1)GOTO 5
      IF(NP4.EQ.2) GOTO 600
      PXRMAX=30.
      PYRMAX=30.
      WRITE(2,7)
7     FORMAT(*EINSCHUSSRICHTUNG : [001]*)
      GOTO 124
5     PXRMAX=50.
      PYRMAX=40.
      WRITE(2,8)
8     FORMAT(*EINSCHUSSRICHTUNG : [1-10]*)
      GOTO 124
600   PXRMAX=20.
      PYRMAX=25.
      WRITE(2,601)
601   FORMAT(*EINSCHUSSRICHTUNG : [1-12]*)
124   IF(NP6.EQ.0) WRITE(2,127)
127   FORMAT(*OHNE STUFEN*)
      IF(NP6.EQ.1) WRITE(2,125)NK
125   FORMAT(*STUFEN AUFWAERTS, STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
      IF(NP6.EQ.2) WRITE(2,128)NK
128   FORMAT(*STUFEN ABWAERTS, STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
      IF(NP6.EQ.3) WRITE(2,131)NK
131   FORMAT(*STUFEN ALTERNIEREND, STUFENABSTAND : NK=*,I4,* STOESSE*)
6     IF(T.EQ.0.)GOTO 9
      WRITE(2,1)T
1     FORMAT(*ANISOTROPE GITTERSCHWINGUNGEN, T=*,F5.0,*K*)
      GOTO 10
9     WRITE(2,2)
2     FORMAT(*STARRES GITTER*)
10    IF(NP1.EQ.1) GOTO 11
      WRITE(2,12)
12    FORMAT(*ENERGIEVERLUST STOSSPARAMETER-UNABHAENGIG*)
      GOTO 17
11    WRITE(2,13)
13    FORMAT(*ENERGIEVERLUST NACH ROBINSON*)
17    IF(NP2.NE.0)GOTO 14
      WRITE(2,15)
15    FORMAT(*OHNE SAUERSTOFF*)
      GOTO 23
14    WRITE(2,16)NP2,H
16    FORMAT(*MIT 1/*,I2,* ML SAUERSTOFF,HOEHE =*,F6.3,* ANGSTROM*)
      IF(NP5.EQ.2) GOTO 31
      IF(NP5.EQ.0)GOTO 21
      IF(NP4.EQ.2) GOTO 28
      WRITE(2,22)
22    FORMAT(*BRUECKENPOSITION UEBER DER KETTE*)
      GOTO 23
21    WRITE(2,24)
24    FORMAT(*BRUECKENPOSITION ZWISCHEN ZWEI KETTEN*)
      GOTO 23
28    WRITE(2,29)
29    FORMAT(*TOP-POSITION*)
      GOTO 23
31    WRITE(2,32)
32    FORMAT(*REKONSTRUKTION NACH VAN DEN BERG*)
23    WRITE(2,65) PYRDET,VC
65    FORMAT(*AUSTRITTSWINKEL BIS : *,F5.2,* GRAD (PYRDET)*,/,
     .+  *KRITISCHE GESCHWINDIGKEIT  VC =*,F5.2,*E8 CM/S*)
      WRITE(2,62) B1,B2
62    FORMAT(*B1 =*,F5.2,* CM  ;  B2 =*,F5.2,* CM*)
C
C   BERECHNUNG VON KONSTANTEN:
```

```
C
      RAD=PI/180
      DE=EIN/10000.
      HWB=2.95
      EWB=HWB/SQRT(ALOG(2.))
C
C   START DER EINSCHUSSWINKEL-SCHLEIFE
C  ODER SPUR EINES EINZELNEN TEILCHENS:
C
      NAT=1
      IF(NP3.EQ.2.OR.NP7.EQ.0) NET=1
      DO 300 NT=NAT,NET
      NTS=NT
      IF(NP7.EQ.2)NTS=NET+1-NT
      IF(NP9.EQ.2) GOTO 60
      PHI=PHIF(NTS)
      IF(NET.EQ.1) PHI=WEINZ
      THETA=W
      GOTO 61
60    THETA=THETAF(NTS)
      IF(NET.EQ.1) THETA=WEINZ
      PHI=W
61    PHIRAD=PHI*RAD
      THERAD=THETA*RAD
      IF(NP9.EQ.2) GOTO 410
      WRITE(2,50) PHI
50    FORMAT(/,/,/,*  PHI =*,F5.2,* :*,/,*--------------------*,/)
      GOTO 412
410   WRITE(2,411) THETA
411   FORMAT(/,/,/,* THETA =*,F5.2,* :*,/,*--------------------*,/)
C
C  ANFANGSWERTE GLEICH NULL SETZEN :
C
412   DO 52 L=1,10
52    NE(L)=0
      DO 53 LT=1,11
      NT1(LT)=0
53    NT10(LT)=0
      DO 54 J=1,31
      DO 55 I=1,20
55    NF(I,J)=0
      DO 56 MPYRN=1,10
56    MP(MPYRN)=0
      DO 57 MAPYRN=1,12
57    MAP(MAPYRN)=0
54    CONTINUE
      DO 58 NPHI=1,12
      NDET(NPHI)=0
      HEG(NPHI)=0.
      SVS(NPHI)=0.
      SVM(NPHI)=0.
58    CONTINUE
      NACHWB=0
      NPXR=0
      NPYR=0
      NGW=0
      NEX=0
      NYMAX=0
      NMD=0
      TARG=0
      EMEAN=0
      IF(NP3.EQ.1)WRITE(2,35)
35    FORMAT(/,/,3H  I,3H  J,7H  XANF ,8H     XEND,8H     YEND,
     +   8H     YMIN,7H    PXR ,7H    PYR ,7H     PR ,
     +   7H    E   ,7H  EOUTP,7H    NCOL,
```

```
     +   7H   END ,5H ANR ,/)
      IF(NP3.EQ.2) GOTO 129
      NAS=1
      NES=N
      MAS=1
      MES=M
      GOTO 132
129   NAS=JA
      NES=JA
      MAS=IA
      MES=IA
132   DO 90 J=NAS,NES
      DO 80 I=MAS,MES
      IZ=I
      JZ=J
C
C  EINLESEN DER ENDDATEN EINES TEILCHENS :
C
      READ(3,100) PXR,PYR,E,NEND
100   FORMAT(2F7.2,F8.0,I2)
      PXRRAD=PXR*RAD
      PYRRAD=PYR*RAD
      IF(NEND.EQ.1) NPXR=NPXR+1
      IF(NEND.EQ.2) NPYR=NPYR+1
      IF(NEND.EQ.3) NEX=NEX+1
      IF(NEND.EQ.4) NYMAX=NYMAX+1
      IF(NP3.EQ.2) WRITE(2,35)
      CALL OUT(NEND)
C
C  ENDE DER J-SCHLEIFE :
C
80    CONTINUE
C
C  ENDE DER I-SCHLEIFE :
C
90    CONTINUE
C
C  BERECHNUNG VON GESAMTERGEBNISSEN :
C
      EMEAN=EMEAN/NACHWB
      WRITE(2,85)NACHWB,NPXR,NPYR,NGW,NEX,NYMAX,NMD,TARG,EMEAN
85    FORMAT(/,*NACHWB =*,I4,  * ;  NPXR =*,I4,* ;  NPYR =*,I4,
     +       * ;  NGW =*,I4,
     +       * ;  NEX =*,I4,* ;  NYMAX =*,I4,* ;  NMD =*,I5,
     +       * ;  TARG =*,F9.2,* ;  EMEAN=*,F7.2,/,/)
      WRITE(2,91) PHIOUT,NDET,HEG
91    FORMAT(*VERTEILUNGEN ALS FUNKTION DES AUSTRITTSWINKELS :*,/,/,
     +  *PHI=0 BIS :*,12F8.2,/,
     +  *      NDET :*,12I8  ,/,
     +  *       HEG :*,12F8.4,/,/)
      WRITE(2,89) MP
89    FORMAT(*VERTEILUNG DER AUSTRITTSWINKEL PHI :*,/,
     +*PHI    :    0-1   1-2   2-3   3-4   4-5   5-6*,
     +        *   6-7   7-8   8-9  9-10*,/,
     +  *ANZAHL:*,10I6,/,/)
      WRITE(2,81)MAP
81    FORMAT(*PHI    :    0-5  5-10 10-15 15-20 20-25 25-30 30-35*,
     +                * 35-40 40-45 45-50 50-55 55-60*,/,
     +  *ANZAHL:*,12I6,/,/)
      WRITE(2,86) NE
86    FORMAT(*ENERGIEVERTEILUNG DER NACHWEISBAREN TEILCHEN:*,/,
     +*KANAL-NR:     1    2    3    4    5    6    7    8    9   10*,/,
     +*ANZAHL   :*, 10I5,/,/)
C
C  FALTUNG MIT LICHTANREGUNGSWERTEN VON TRUCKENBRODT
```

```
C  UEBER ENERGIEVERTEILUNG :
C
      HEPL=0
      HENT=0
      DO 200 LEPL=1,10
200   HEPL=HEPL+NE(LEPL)*APL(LEPL)
      HEPL=HEPL/(M*N)
      DO 210 LENT=1,10
210   HENT=HENT+NE(LENT)*ANT(LENT)
      HENT=HENT/(M*N)
      WRITE(2,220) HEPL,HENT
220   FORMAT(*LICHTINTENSITAETEN : 468.6 NM ( HE + ) : *,F5.3,
     +       * ;   587.6 NM ( HE-O ) : *,F5.3,/,/)
C
C  ENDE DER EINSCHUSSWINKEL - SCHLEIFE :
C
300   CONTINUE
      TIME=SECOND(A)-TIME
      WRITE(2,95)TIME
95    FORMAT(/,/,*RECHENZEIT :*,F10.3,* SEC*,/)
      END
      SUBROUTINE OUT(NEND)
      DIMENSION TEND(6),TANR(3)
      COMMON/OUTP/IZ,JZ,XANF,PXR,PYR,F,EIN,EKEV,DE,AY2,EOUTP,EMEAN,
     +  NCOL,NO,APL(10),ANT(10),PXRRAD,PYRRAD,X,Y,MP(10),MAP(12),
     +  YMIN,RAD,NE(10),NT1(11),NT10(11),NP1,NP3,NP9,XEX,YEX,SEX,KLE,
     +  NDET(12),HEG(12),SVS(12),SVM(12),PHIOUT(12),PYRDET,
     +  NACHWB,NMD,NGW,NP10,VC,B1,B2,EWB,DEB,NPN
      DATA TEND/7H  PXR  ,7H    PYR,7H EX *  ,7H    *  ,
     +          7H EX GW ,7H    GW /
      DATA TANR/5H     ,5H OBER,5HSAUER/
      PR=SQRT(PXR*PXR+PYR*PYR)
      E=E/1000.
      EN=EIN/1000
      VCR=VC
C
C  BESTIMMUNG DER NACHWEISVARIABLEN NEND = 5;6 :
C
      IF(NEND.EQ.3.AND.PYR.GT.PYRDET) NEND=5
      IF(NEND.EQ.4.AND.PYR.GT.PYRDET) NEND=6
      IF(NEND.EQ.5.OR.NEND.EQ.6) NGW=NGW+1
C
C  AUSDRUCKEN DES ENDERGEBNISSES EINES TEILCHENS :
C
20    IF(NP3.EQ.1) WRITE(2,10)IZ,JZ,XANF,X,Y,YMIN,PXR,PYR,PR,
     +  E,EOUTP,NCOL,TEND(NEND)
10    FORMAT(I3,I3,F7.3,3F8.2,3F7.2,F7.1,F7.2,I7,A7)
C
C  WINKELVERTEILUNG ALLER AUSTRETENDEN TEILCHEN :
C
      IF(NEND.LE.2) GOTO 50
      MPYR=INT(PYR)+1
      IF(MPYR.GT.10.) GOTO 34
      MP(MPYR)=MP(MPYR)+1
34    MAPYR=INT(PYR/5.)+1
      MAP(MAPYR)=MAP(MAPYR)+1
C
C  ENERGIEVERTEILUNG DER NACHWEISBAREN TEILCHEN :
C
      IF(NEND.GE.5) GOTO 26
31    NACHWB=NACHWB+1
      EMEAN=EMEAN+E
      DO 60 LE=1,10
      IF(E.GT.(EN-(11-LE)*DE).AND.E.LE.(EN-(10-LE)*DE)) GOTO 70
60    CONTINUE
```

```
70      NE(LE)=NE(LE)+1
        KLE=LE
C
C   BERECHNUNG VON KONSTANTEN :
C
76      VB=2.2
        TAU=.207
        IF(NPN.EQ.0) TAU=1.55
        VO=SQRT(E/100.)
        V=VB*VO
        IF(V.LE.0.05) GOTO 35
C
C   ANREGUNG :
C
        VI=VO*VO*VO
        IF(NPN.EQ.0) VI=1./(1.+.6*VI)
C
C   GEWICHTUNG MIT AUGER - ABREGUNG :
C
        VSENK=V*SIN(PYRRAD)
        VI=VI*EXP(-VCR/VSENK)
C
C   LAUFZEITEFFEKT :
C   B2 = 1.45 CM ( SENKRECHTE BLENDE )
C   B2 = 2.80 CM ( WAAGRECHTE BLENDE )
C
        ST=COS(PXRRAD)*COS(PYRRAD)*V*TAU
        VI=VI*(EXP(-B1/ST)-EXP(-B2/ST))
C
C   DOPPLER - EFFEKT :
C
        DLAM=1.562*V*SIN(PXRRAD)
        VI=VI*EXP(-(DLAM/EWB)**2)
C
C   FUER VERTEILUNGEN ALS FUNKTION DES AUSTRITTSWINKELS :
C
35      DO 28 NPHI=1,12
        IF(PYR.GT.PHIOUT(NPHI)) GOTO 28
        NDET(NPHI)=NDET(NPHI)+1
        HEG(NPHI)=HEG(NPHI)+VI
28      CONTINUE
50      RETURN
        END
```

## 11. LITERATURVERZEICHNIS


1 H.P. Bonzel, Surf.Sci.68 (1977) 236

2 H.A. van Hove, S.Y. Tong,
"Surface Crystallography by LEED",
Springer Verlag, Berlin 1979

3 W. Englert, E. Taglauer, W. Heiland,
Surf.Sci. 117 (1982) 124

4 J.A. van den Berg, L.K. Verhej, D.G. Armour,
Surf.Sci. 91 (198o) 218

5 A.G.J. deWit, R.P.N. Bronckers, Th.M. Hupkens,
J.M. Fluit, Surf. Sci 9o (1979) 676

6 J.F. van der Veen, R.M. Tromp, R.G. Smeenk, F.W.Saris,
Surf. Sci. 82 (1979) 468

7 R. Sizmann, C. Varelas, Nucl. Instr. Meth. 132 (1976) 633

8 C. Varelas, H.D. Carstanjen, R. Sizmann,
Phys. Lett. 77 A(198o) 469

9 C. Varelas, H.D. Carstanjen,
Bericht über das Arbeitstreffen der Verbünde 4002
und 4003, Bamberg 1979

1o C. Varelas, R. Sizmann, Surf. Sci. 71 (1978) 51

11 C. Varelas, K. Goltz, R. Sizmann, Surf.Sci. 8o (1979) 524

12 H.G. Berry, L.J. Curtis, D.G. Ellis, R.M. Schectman,
Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 751

13 R. Schiffner, K. Goltz, C. Varelas, Vakuum Technik 26
(1977) 3

14 R. Truckenbrodt, Diplomarbeit, Univ. München (1977)

15 "Low energy electrons and surface chemistry"
G. Ertl, J. Küppers,Verlag Chemie, 1974

16 A.G. Knapp, Surf.Sci. 34 (1973) 289

17 K. Wandelt, G. Ertl, Surf.Sci. 55 (1976) 4o3

18 K. Wandelt, Doktorarbeit, Universität München (1975)

19 W.Y. LEE, J. Eldridge, J. Electrochem. Soc. 124 (1977) 1747

2o R.A. Pollak, C.H. Bajorek, J. Appl. Phys. 46 (1975) 1382

21 V.I. Nefedov, P.P. Pozdeyev, V.F. Dorfman, B.N. Pypkin, Surface and Interface Analysis, Vol. 2, No.1 (198o) 26

22 C.R. Brundle, E. Silverman, R.J. Madix, J. Vac. Sci. Technol. 16 (1979) 474

23 C.R. Brundle, AIP Conf. Proc. (USA) No.61 (198o) 57

24 S.E. Greco, J.P. Roux, J.M. Blakely, Surf. Sci. 12o (1982) 2o3

25 P. Marcus, Surface and Inferface Analysis 4 (1982) 29

26 P. Marcus, A. Teissier, J. Oudar, Surf. Sci. 129 (1983) 432

27 D.A. King, M.G. Wells, Proc. R. Soc. Lond. A 339 (1974) 245

28 P.A. Redhead, J. Vac. Sci. Technol. 6 (1969) 848

29 "The Physical Basis of Ultrahigh Vaccuum" by P.A. Redhead et al. Chapman and Hall, London 1968, S. 29o f

3o T.E. Madey, Surf. Sci. 94 (198o) 483

31 K. Besocke, S. Berger, Proc. 7 th Intern. Vac. Congr. & 3rd Conf. Solid Surface (Vienna 1977), p. 893 und: K. Besocke, S. Berger, Vakuum-Technik 27 (1978)66

32 K. Besocke, H. Wagner, Surf.Sci. 87 (1979) 457

33 E. Bauer, H. Poppa, Surf.Sci. 127 (1983) 243

34 z.B.:C. Kittel, "Einführung in die Festkörperphysik" R. Oldenbourg Verlag München Wien 1969

35 B.D. Campbell, W.P. Ellis, Surf. Sci. 1o (1968) 124

36 W. Erley, H. Ibach, Solid State Comm. 37 (1981) 937

37 K. Molière, F. Portele, in: "The Structure and Chemistry of Solid Surfaces" ed. G.A. Somorjai, Wiley, New York (1969) S.69-1

38 G. Comsa, Surf.Sci. 81 (1979) 57

39 T.M. Lu, M.G. Lagally, Surf.Sci. 99 (198o) 695

4o W.G. Dorfeld, J.B. Hudson, R. Zuhr,
Surf.Sci. 57 (1976) 46o

41 S. Masuda, M. Nishijima, Y. Sakisaka, M. Onchi;
Phys. Rev. B 25 (1982) 863 und:
C. Benndorf, B. Egert, C. Nöbl, H. Seidel, F. Thieme,
Surf. Sci. 92 (198o) 636

42 J.A. van den Berg, L.K. Verheij, D.G. Armour,
Surf. Sci. 91 (198o) 218

43 M. Schuster, C. Varelas, Surf. Sci., im Druck

44 R.G. Smeenck, R.M. Tromp, F.W. Saris,
Surf. Sci. 1o7 (1981) 429

45 G. Ertl, J. Küppers, J. Vac. Sci. Technol. 9 (1971) 829

46 C.W. Tucker, J. Appl. Phys. 37 (1966) 4147

47 G. Ertl, P. Rau, Surf. Sci. 15 (1969) 443 und:
G. Ertl, J. Küppers, Surf. Sci. 21 (197o) 61

48 H.A. Engelhardt, D. Menzel, Surf. Sci. 57 (1976) 591

49 C. Backx, C.P.M. de Groot, P. Biloen
Surf. Sci. 1o4 (1981) 3oo

5o W. Heiland, F. Iberl, E. Taglauer
Surf. Sci. 53 (1975) 383

51 H.P. Bonzel, S. Ferrer, Surf. Sci. 118 (1982) L 263

52 S. Ferrer, H.P. Bonzel, Surf. Sci. 119 (1982) 234

53 K. Christmann, G. Ertl, Z. Naturforsch. 28a (1973) 1144

54 J.L. Taylor, D.E. Ibbotson, W.H. Weinberg,
Surf. Sci. 79 (1979) 349

55 C.M. Chan, K.L. Luke, M.A. van Hove, W.H. Weinberg,
S.P. Withrow, Surf. Sci. 78 (1978) 386

56 R. Ducros, R.P. Merril, Surf. Sci. 55 (1976) 227

57 K.A.R. Mitchell, Surf. Sci. 92 (198o) 79

58 K. Günther, Diplomarbeit, Universität München, 1977

59 H.-D. Carstanjen, Doktorarbeit, Universität München, 1973

6o C. Lehmann, G. Leibfried, Z. Phys. 172 (1963) 4o5 und:
G. Leibfried, "Bestrahlungseffekte in Festkörpern",
B.G. Teubner, Stuttgart (1965), S. 54

61 C. Varelas, R. Sizmann, Rad. Eff. 25 (1975) 163

62 J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff,
Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36, no.1o (1968)

63 R.J. Glauber, Phys. Rev. 98 (1955) 1692

64 R.H. Wilson, E.F. Skelton, J.L. Katz,
Acta Cryst. 21 (1966) 635

65 D.P. Jackson, Surf. Sci. 43 (1974) 431

66 D.S. Gemmell, Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 129

67 A.U. McRae, Surf. Sci. 2 (1964) 522

68 R.F. Wallis, in: "The Structure and Chemistry of
Solid Surfaces", ed. G.A. Somorjai, Wiley, New York (1969)
17-1

69 G. Rovida, M.Torrini, E. Zanazzi,
Chem. Phys. Lett.3 (1969) 2o1

7o D.E. Knuth, "The Art of Computer Programming",
Vol. 2,Addison Wesley, 1969, S. 1o4

71 K. Neumann, "Operations Research Verfahren"
C. Hanser, München Wien, 1977

72 B. Poelsema, L.K. Verhey, A.L. Boers,
Surf. Sci. 6O (1976) 485

73 D.J. Martin, Surf. Sci. 97 (198o) 586

74 G. Leibfried, in: Handbuch der Physik, Herausg.:
S. Flügge, Bd. VII, Teil 1, Springer Verlag, Heidelberg,
1955

75 H. Ibach, D. Bruchmann, Phys. Rev. Lett. 44 (198o) 36

76 J.E. Black, Surf. Sci. 1o5 (1981) 59

77 J.F. Ziegler, "Helium Stopping Powers in all Elemental
Matter", Pergamon Press, New York (1977)

78 J. Lindhard, A. Winter, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.
34, no. 4 (1964)

79 D. Issakson, Int. Rep. New York Univ. (1975)

8o O.B. Firsov, Sov. Phys. Jetp., Vol. 36 (1959) 1o76

81 O.S. Oen, M.T. Robinson, Nucl. Instr. Meth.132 (1976) 647

82 J. Lindhard, M. Scharff, Phys. Rev. 124 (1961) 128

83 E.J. Sternglass, Phys. Rev. 1o8 (1957) 1

84 R.A. Baragiola, E.V. Alonso, J. Ferron, A. Oliva-Florio, Surf. Sci. 9o (1979) 24o

85 U.v.Gemmingen, Doktorarbeit, Universität München (198o)

86 U.V. Gemmingen, Surf. Sci. 12o (1982) 334

87 J.B. Marion, F.C. Young, "Nuclear Reaction Analysis" North-Holland Publ. Comp., Amsterdam (1968)

88 J.C. Armstrong, J.V. Mullendore, W.R. Harris, J.B. Marion, Proc. Phys. Soc. 86 (1965) 1283

89 S. Kreußler, Doktorarbeit, Univ. München (198o) und: S. Kreußler, R. Sizmann, Phys.Rev. B 26 (1982) 52o

9o L.P. Erasmus, Diplomarbeit, Univ. München (1982)

91 H. Winter, Diplomarbeit, Univ. München (1982)

92 B. Dynefors, I. Martinson, E. Veje, Physika Scripta 13 (1976) 3o8

93 H.D. Hagstrum, in: Inelastic Ion-Surface Collisions, (eds. N.H. Tolk et al.), Academic Press, New York, 1977

94 S.Y. Leung, N.H. Tolk, W. Heiland, J.C. Tully, J.S. Kraus, P. Hill, Phys. Rev. A 18 (1978) 447

95 C.B. Kerkdijk, C.M. Smits, D.R. Orlander, F.W. Saris, Surf. Sci. 49 (1975) 45

96 W.S. Bickel, K. Jensen, C.S. Newton, E. Veje, Nucl. Instr. Meth. 9o (197o) 3o9

97 W.E. Baird, M. Zivitz, E.W. Thomas, Phys. Rev. A 12 (1975) 876

98 J. Lindhard, Mat. Fys. Medd. Kgl. Dans. Vid. Selsk. 34, no. 14 (1965)

99 C. Varelas, R. Sizmann, Rad. Effects 16 (1972) 211

1oo R.D. Edge, R. Sizmann, C. Varelas, Rad. Effects 22 (1974) 79

1o1 R. Sizmann, C. Varelas, Nucl. Instr. Meth. 132 (1976) 633

1o2 V.I. Shulga, Rad. Effects. 26 (1975) 61

1o3 U. Bill, R. Sizmann, C. Varelas, K.E. Rehm,
Rad. Effects. 27 (1975) 59

1o4 C. Varelas, Habilitationsschrift, Univ. München 1979

1o5 Y. Quéré, Phys. Stat. Sol. 3o (1968) 713

1o6 K.A.R. Mitchell, Surf. Sci. 92 (198o) 79

1o7 H.J. Andrä, Phys. Lett. 54A, 315 (1975)

1o8 H.J. Andrä, R. Fröhling, H.J. Plöhn, J.D. Silver,
Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 1212

1o9 H.J. Andrä, H.J. Plöhn, A. Gaupp, R. Fröhling,
Z. Phys. 281, 15 (1977)

11o H.G. Berry, Gabrielse, G. A.E. Livingston, R.M. Schectman,
Desesquelles, J., Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 1473

111 H.G. Berry, G. Gabrielse, A.E. Livingston,
Phys. Rev. A 16 (1977) 1915

112 H.G. Berry, G. Garielse, A.E. Livingston,
Nucl. Instr. Meth. 149 (1978) 517

113 N.H. Tolk, J.C. Tully, J.S. Kraus, W. Heiland, S.H. Neff
Phys. Rev. Lett. 41 (1978) 643

114 N.H. Tolk, J.C. Tully, J.S. Kraus, W. Heiland,
S.H. Neff, Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 1475

115 N.H. Tolk, J.C. Tully, J.S. Kraus, W. Heiland,
S.H. Neff, Surf. Sci. 9o (1979) 447

116 J.C. Tully, N.H. Tolk, J.S. Kraus, R. Rau. R.J. Morris,
in: Inelastic Particle-Surface Collisions
(eds. E. Taglauer, W. Heiland ) Springer Verlag,
Heidelberg, 1981

117 W. Graser, C. Varelas, in: siehe Ref. 116

118 H.J. Andrä, H. Winter, R. Fröhling, N. Kirchner,
H.J. Plöhn, W. Wittmann, W. Graser, C. Varelas,
Nucl. Instr. Meth. 17o (198o) 527

119 H.J. Andrä, R. Fröhling, H.J. Plöhn, in:
Inelastic Ion-Surface Collisions (eds. N. H. Tolk et al.)
Academic Press, New York, 1977

12o H.J. Andrä, R. Fröhling, H.J. Plöhn, W. Winter, W. Wittmann, Journal de Physique C1 (1979) 275

121 P.J. Martin, R.J. Berzins, R.J. MacDonald, Surf. Sci. 95 (198o) L277

122 E.O. Rausch, M.W. Murray, J. Inouye, E.W. Thomas, J. Appl. Phys. 48 (1977) 4347

123 H. Schröder, E. Kupfer, Z. Phys. A 279 (1976) 13

124 A. Cobas, W.E. Lamb, Phys. Rev. 65 (1944) 327

125 H. Bethe, in: Handbuch der Physik (2. Aufl.) ed. H. Geiger, K. Scheel, Springer Verlag, Berlin (1933) S. 364

126 W. Wittmann, H.J. Andrä, Z. Phys. A 288 (1978) 335

127 H. Winter, in: siehe Lit.Hinweis 117

128 V. Kempter, Surf. Sci. 9o (1979) 461

129 J.C. Brenot, D. Dhuicq, J.P. Gauyacq, J. Pommier, V. Sidis, M. Barat, E. Pollack, Phys. Rev. A 11 (1975) 1933

13o E. Kupfer, H. Gabriel, J. Burgdörfer Z. Phys. A 3oo (1981) 35

131 A. Denis, J. Desesquelles, M. Druetta, D.J. Pegg, Nucl. Instr. Meth. 194 (1982) 363

132 siehe Diskussion in: J. Burgdörfer, Nucl. Instr. Meth. 2o2 (1982) 253

Ich möchte mich bedanken

bei Herrn Prof. Dr. R. Sizmann für die Arbeitsmöglichkeit an seinem Institut ;

bei Herrn Dr. habil. C. Varelas für die Betreuung und tatkräftige Unterstützung, sowie für viele anregende, unermüdliche und geduldige Diskussionen ;

bei Herrn W. Stadler für die Hilfe bei der Arbeit am Beschleuniger ;

bei Herrn H. Bradatsch für photographische Arbeiten .

Lebenslauf :

Geboren : 6.8.1948 in Ludwigsburg

Schulausbildung :

1955 - 1959 : Volksschule in Ludwigsburg
1959 - 1968 : Gymnasium in Oberstdorf
23.7.1968 : Abitur am Gymnasium Oberstdorf

Berufsausbildung :

1968 - 1974 : Studium der Physik an der Universität Stuttgart
Thema der Diplomarbeit :
" Aufbau und Untersuchung eines HCN - Lasers. Interferometrische Bestimmung der Elektronendichteverteilung im Plasma des MPD - Beschleunigers X 9 ."
15.12.1974 : Abschluß des Studiums als Diplomphysiker

Berufstätigkeit :

1975 - 1977 : Lehrkraft für Mathematik und Physik an Gymnasien in Stuttgart und Mühldorf
seit 1.9.1977 : wissenschaftlicher Angestellter der Sektion Physik der Ludwig - Maximilians - Universität München, Lehrstuhl Prof. Dr. R. Sizmann ;
in dieser Zeit Anfertigung der Dissertation